

# РОЛЬ ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКИХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ И НАЧАЛЬНОГО ПОЛОЖЕНИЯ МОЛЕКУЛЫ ЦИТОХРОМА С В МОДЕЛИ БРОУНОВСКОЙ ДИНАМИКИ ОБРАЗОВАНИЯ ПРЕДВАРИТЕЛЬНОГО КОМПЛЕКСА С III ДЫХАТЕЛЬНЫМ КОМПЛЕКСОМ В КРИСТЕ МИТОХОНДРИИ

Абатурова А.М., Ризниченко Г.Ю.

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, биологический ф-т, кафедра биофизики, Россия, 119991, Москва, Ленинские горы 1, стр. 12, +7(495)9390289, abaturova@list.ru

Молекулы белка цитохрома С (цитС) переносят электроны между III и IV дыхательными комплексами в межмембранном пространстве и в кристах митохондрий. III и IV дыхательные комплексы могут образовывать суперкомплексы – респирасомы. Предполагается, что образование респирасом ускоряет транспорт электрона цитС.

В данной работе исследовалось влияние электростатических взаимодействий и начального положения молекул цитС на кинетическую кривую связывания с III дыхательным комплексом. Использовалась модель, построенная в программе броуновской динамики ProKSim [1]. Моделировались диффузия цитС (pdb ID 3O1Y) в участке кристы  $120 \times 300 \times 300 \text{ \AA}$  и связывание цитС с неподвижным димером III дыхательного комплекса (III<sub>2</sub>, 1BGY). Мембраны учитывались как геометрические ограничения. Значения параметров модели были равны значениям, оцененным ранее в [2]. Кинетическая кривая связывания белков для каждого начального положения состояла из 5000 точек. Из кривых определяли время полупревращения образования предварительного комплекса белков  $t_{1/2}$ .

Исследовалось 7 начальных положений цит С, у которых расстояние от атома Fe до Fe гема активного III мономера было  $56 \text{ \AA}$ , отстоящих на  $5 \text{ \AA}$  от поверхности мембраны. Для 3 начальных положений цит С при Fe-Fe= $56 \text{ \AA}$ , лежащих ближе к IV комплексу в респирасоме 5GPN, получено  $t_{1/2} 2.4\text{-}6.4 \cdot 10^{-7}$  с. При диффузии цитС из этих положений без учета электростатических взаимодействий  $t_{1/2} 7.15\text{-}7.45 \cdot 10^{-6}$  с. Для остальных 4 положений  $t_{1/2} 1\text{-}1.5 \cdot 10^{-6}$  с. При диффузии цит С из 4 начальных положений, удаленных более, чем на  $60 \text{ \AA}$  от III<sub>2</sub>, получено  $t_{1/2} 1.3\text{-}2.2 \cdot 10^{-6}$  с. Таким образом, в исследуемом реакционном объеме молекула цит С быстро переходит в область притяжения III<sub>2</sub>, где под действием электростатических сил из участков вблизи IV происходит направленная диффузия, что обеспечивает быстрый транспорт электрона в респирасоме.

Исследование выполнено в рамках научного проекта государственного задания МГУ №121032500060-0

## Литература.

1. Хрущев С.С. и др. // КИМ, том 5, № 1, 2013, 47-64.
2. Abaturova A.M. et. al. // ITM Web of Conferences, V. 31., 2020. DOI: 10.1051/itmconf/20203104001