

## ПРЯМОЕ КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ФЕРРЕДОКСИНА И ФЕРРЕДОКСИН:НАДФ<sup>+</sup>-ОКСИДОРЕДУКТАЗЫ

Дьяконова А.Н., Коваленко И.Б., Абатурова А.М., Ризниченко Г.Ю.

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова,  
Биологический ф-т, каф. Биофизики,  
Россия, 119992, Москва, Ленинские горы, МГУ,  
Тел. (495)9390289, e-mail: [alex-diakonova@yandex.ru](mailto:alex-diakonova@yandex.ru)

Ферредоксин, восстановленный фотосистемой I на свету, служит электронным донором для восстановления НАДФ<sup>+</sup> до НАДФН и других реакций углеродного, азотного и серного метаболизма. Реакция восстановления НАДФ<sup>+</sup> катализируется ферментом ферредоксин:НАДФ<sup>+</sup>-оксидоредуктазой (ФНР). Кинетика и механизмы связывания ферредоксина и ФНР активно изучались экспериментально при помощи методов сайт-специфического мутагенеза, лазерного флеш-фотолиза и стоп-флоу. Нами была разработана основанная на методе броуновской динамики модель взаимодействия этих двух белков, учитывающая электростатические взаимодействия и форму молекул.

В модели молекулы белков диффундируют в кубическом реакционном объеме под действием случайной броуновской силы. Несмотря на то, что наша модель не учитывает конформационные перестройки белков и электронный транспорт, она позволяет оценить вклад электростатических взаимодействий и константы скорости связывания белков [1,2].

При помощи модели мы исследовали кинетику взаимодействия диких типов и мутантных форм ферредоксина и ФНР при разных значениях ионной силы. Полученные в модели константы скорости второго порядка сравнили с экспериментальными данными и получили качественное соответствие. Моделирование показало, что электростатические взаимодействия играют важную роль во взаимодействии ферредоксина и ФНР и определяют его специфичность.

### Литература

1. Kovalenko I.B., Abaturova A.M., Gromov P.A., Ustinin D.M., Grachev E.A., Riznichenko G.Yu., Rubin A.B. Direct simulation of plastocyanin and cytochrome f interactions in solution // *Phys. Biol.* **3**, 2006. P. 121-129.
2. Kovalenko I.B., Diakonova A., Abaturova A., Riznichenko G. Direct simulation of ferredoxin and FNR complex formation in solution // *Proceedings of the 16<sup>th</sup> International Symposium Flavins and Flavoproteins* 2008. P. 437-442.