

Динамика белка в густонаселенной среде клетки

Е.П. Ключников¹, А.А. Жмуров¹, Н.В. Жмурова²¹ Московский физико-технический институт (государственный университет)² Рязанский государственный университет им. С.А. Есенина

Динамика белков и коллоидов в плотных суспензиях имеет важное значение с точки зрения понимания биофизики белков в цитоплазме. Клетка – крайне густонаселенное окружение с крайне высокой концентрацией белка [1]. При попытках воспроизвести такую концентрацию в лабораторных условиях (*in vitro*), белки отвердевают (выпадают в осадок). При этом в живой клетке белки не только способны перемещаться по цитоплазме, но и успешно выполняют свою биологическую функцию [2,3].

В данной работе была построена молекулярно-биологическая модель густонаселенной среды клетки. Белки были представлены в виде единичных частиц, а взаимодействия между ними описывались потенциалом Леннарда-Джонса. Для потенциала взаимодействия выбирались различные параметры – белки либо притягивались, либо отталкивались друг от друга. Считалось, что белки двигаются согласно уравнениям Ланжевена, были использованы периодические граничные условия. Изначальная конформация выбиралась случайным образом – белки были перемешаны (рис. 1а).

В работе показано, каким образом белковый состав клетки влияет на ее общее состояние. Было показано, при каком составе клетка отвердевает, а при каком происходит разделение фаз – белки одного типа группируются вместе (рис. 1б). Также был изучен процесс диффузии белков и коллоидных частиц в густонаселенной среде клетки.

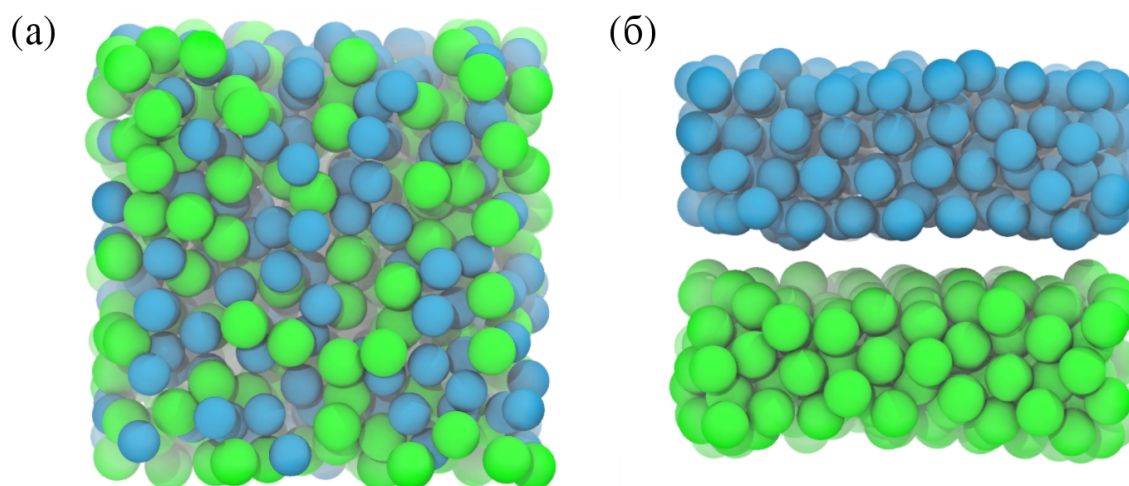


Рис. 1. Компонировка белков в модели. (а): Начальная конформация. (б): Конформация после разделения фаз.

Литература

1. Echeverria C., Kapral R. Macromolecular dynamics in crowded environments // J. Chem. Phys. – 2010. – Т. 132. – №. 10. – С. 104902.
2. Banks D. S., Fradin C. Anomalous diffusion of proteins due to molecular crowding // Biophys. J. – 2005. – Т. 89. – №. 5. – С. 2960-2971.
3. Ando T., Skolnick J. Crowding and hydrodynamic interactions likely dominate in vivo macromolecular motion // P. Natl. Acad. Sci. USA – 2010. – Т. 107. – №. 43. – С. 18457-18462.