

## Параметры модели и получаемые кинетические кривые

В прямой модели молекулы пластоцианина и цитохрома *f* совершают хаотическое броуновское движение. В результате броуновского движения может происходить сближение двух или большего количества белков на расстояние электростатического взаимодействия. При этом белки ориентируются в суммарном электрическом поле других белков и могут занять выгодную позицию для связывания (докинга). Занятие белком выгодной для докинга позиции означает, что расстояния между взаимодействующими частями молекул должно быть меньше некоторых расстояний (параметров модели), которые мы называем расстояниями докинга. Правильный подбор параметров модели (расстояний докинга) обеспечивает выгодную для последующего связывания взаимную ориентацию белков относительно друг друга. Таким образом, расстояниями докинга  $r_i$  мы называем расстояния между определенными аминокислотными остатками молекул пластоцианина и цитохрома, при которых происходит образование комплекса. Связывание белков, занимающих выгодную взаимную ориентацию, происходит с некоторой вероятностью  $P$ , которую мы называем вероятностью докинга. После связывания восстановленная молекула цитохрома *f* передает электрон на находящийся с ней в комплексе пластоцианин за некоторое время. При этом происходит изменение редокс-состояния молекул. Время передачи электрона в комплексе, вероятность связывания белков (докинга) и расстояния докинга являются параметрами прямой модели.

В качестве расстояний докинга мы взяли расстояние между атомами Cu и Fe, а также расстояния между аминокислотными остатками Pc и *cyt f*, которые в комплексе из (Ubbink, Ejdebeck et al. 1998) находятся в непосредственном соседстве.

В модели на каждом шаге подсчитывается суммарное количество восстановленных и окисленных молекул пластоцианина и цитохрома *f*, таким образом, имеется возможность строить кинетические кривые изменения

редокс-состояния белков. На рис. 1 показана кривая окисления цитохрома f, полученная на прямой модели. Аппроксимируя полученную кинетическую кривую законом действующих масс, мы можем получить значение константы скорости реакции второго порядка связывания молекул пластоцианина и цитохрома f.

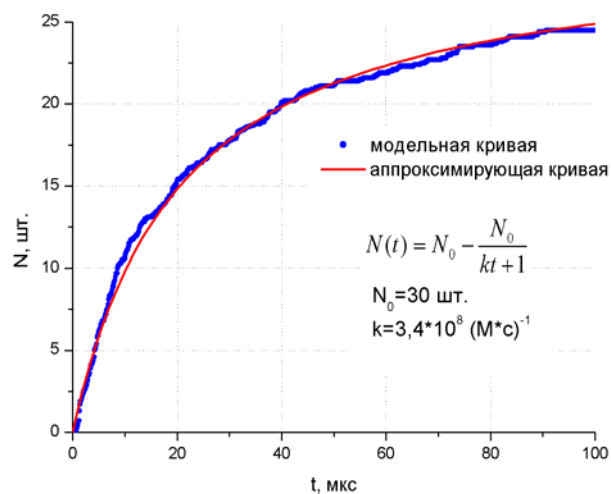


Рис. 1. Кинетическая кривая окисления цитохрома f (количество молекул указано в штуках), полученная на прямой модели, и ее аппроксимация по закону действующих масс (формула на рисунке).