

Статья публикуется по материалам выступления на XX Всероссийской конференции “Структура и динамика молекулярных систем”. Яльчик-2013.

Публикация доступна для обсуждения в рамках функционирования постоянно действующей интернет-конференции “Бутлеровские чтения”. <http://butlerov.com/readings/>
Поступила в редакцию 3 июля 2013 г. УДК 577.153.

Взаимодействие глицеральдегид-3-фосфатдегидрогеназы человека с кофактором по данным молекулярного докинга

© Макшакова⁺ Ольга Николаевна и Ермакова* Елена Андреевна

Казанский институт биохимии и биофизики КазНЦ РАН. Ул. Лобачевского, 2/31. г. Казань, 420111.
Республика Татарстан. Россия. Тел.: (843) 292-62-88. E-mail: makshakova@gmail.com

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: глицеральдегид-3-фосфатдегидрогеназа, никотинамиддинуклеотид, молекулярный докинг.

Аннотация

Проведен анализ взаимодействия тетрамера глицеральдегид-3-фосфатдегидрогеназы с кофактором НАД расчетными методами. Метод молекулярного докинга был применен для определения энергии взаимодействия молекул кофактора с белком, метод Gaussian network model был использован для оценки изменения подвижности основной цепи белка в результате связывания кофактора. Показано, что молекулы кофактора образуют устойчивые комплексы с тетрамером белка, при этом энергия взаимодействия одной молекулы кофактора с разными субъединицами апо-формы белка различаются незначительно. В то же время присутствие других молекул НАД в комплексе систематически уменьшает энергию взаимодействия белок – кофактор, что может давать вклад в отрицательную кооперативность связывания молекул кофактора с тетрамером глицеральдегид-3-фосфатдегидрогеназы.