

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ЭЛЕКТРИЧЕСКИХ ПОЛЕЙ СОЛЬВАТНЫХ ОБОЛОЧЕК ТУБУЛИНА И МЕХАНИЗМ ЕГО САМОСБОРКИ В МИКРОТРУБОЧКИ

Стефанов В.Е., Тулуб А.А.

Санкт-Петербургский государственный университет, Биолого-почвенный ф-т
Россия, г.Санкт-Петербург, Университетская наб.7/9, E-mail: vastef@mail.ru

Изучен физический механизм самосборки микротрубочек (наноструктур биологического происхождения) из $\alpha\beta$ -димеров тубулина. Процесс запускается связыванием β -субъединицы с комплексом $Mg^{2+}GTP$ и последующим его гидролизом. Методом "возбуждение-зондирование" и фемтосекундной спектроскопии мы показали [1], что под действием облучения этот процесс проходит и без Mg^{2+} . Его механизм опосредован сольватной оболочкой тубулина - слоем молекул «биологической воды» толщиной 0.7 nm, удерживаемым водородными связями, в котором аккумулируются электроны. В тубулине есть внутреннее электрическое поле ($\approx 10^{-3}$ V/cm), направленное от α - к β -субъединице. По данным молекулярного моделирования [2] кольцевые резонансные электронные структуры Trp, Tug, His, Phe формируют в молекуле тубулина цепь, связанную с GTP, запускающим в ней электронный ток под действием Mg^{2+} . Связывание Mg^{2+} в форме $Mg^{2+}(H_2O)_4$ с GTP переводит комплекс в триплетное состояние. Наши расчеты показали возможность триплет-синглетных (T-S) переходов в наносекундном диапазоне (спиновый запрет не относится к процессам, для которых ядерная и электронная волновые функции не разделены). Состояния T и S занимают самую высокую и самую низкую зоны электронной проводимости системы тубулин-вода. Очевидно, лазерное облучение возбуждает переходы электронов, инициирующие в этой системе процессы, аналогичные происходящим под действием Mg^{2+} . В белке электронный ток, инициируемый электронными переходами, благодаря сильному взаимодействию с сольватной оболочкой, может быть значительно усилен за счет нелинейных эффектов. Модельный анализ системы тубулин-вода в слабом внешнем поле показал, что ее электрическое поле возрастает на 7-8 порядков благодаря поляризационным эффектам. Таким образом, взаимодействие электрического поля сольватной оболочки активированной молекулы тубулина с полями других молекул тубулина может обеспечивать их ориентацию и способствовать самосборке тубулина в микротрубочки.

INTERACTION OF TUBULIN SOLVATIC SHELLS' ELECTRIC FIELDS AND MECHANISM OF MICROTUBULES' SELF-ASSEMBLY

Stefanov V.E., Tulub A.A.

St.Petersburg State University. E-mail: vastef@mail.ru.

By means of femtosecond spectroscopy and quantum chemistry analysis interaction of tubulin solvatic shells' electric fields was shown to contribute to microtubules formation. The role of electron transitions in the process is elucidated.

Литература

1. Stefanov V.E., Tulub A.A. Migration of protons in a chain of tyrosine residues// Int. J. Quant. Chem. 2001. V. 84. N 4. P. 409-415.
2. Tulub A.A., Stefanov V.E. Activation of Tubulin Assembly into Microtubules upon a Series of Repeated Femtosecond Laser Impulses// J.Chem.Phys. 2004, V. 121, №22, P. 11345-11350