

ПРИОРИТЕТНОЕ НАПРАВЛЕНИЕ VI.50. БИОФИЗИКА. РАДИОБИОЛОГИЯ. МАТЕМАТИЧЕСКИЕ МОДЕЛИ В БИОЛОГИИ. БИОИНФОРМАТИКА

Программа VI.50.1. Компьютерно-экспериментальный анализ и моделирование молекулярно-генетических, биофизических, экосистемных и биосферных процессов (координатор акад. Н. А. Колчанов)

В Институте биофизики в целях проверки гипотезы о смещении баланса потоков углерода в системе биота—атмосфера в сторону выделения углекислого газа при повышении температуры для оценки скоростей суммарного дыхания и фотосинтеза проведена серия опытов на экспериментальной замкнутой миниэкосистеме (МЭС) с возмущением стационарного состояния при различных температурах. Возмущение стационарного состояния осуществлялось выключением-включением освещения и импульсной подачей CO_2 при наличии освещения. Анализ сложной динамики МЭС оказался возможным с помощью разработанной математической модели, учитывающей активацию дыхания растений в темноте и включающей внутренние (не измеряемые в эксперименте) переменные, описывающие динамику: 1) ключевого фермента фотосинтеза (предположительно RUBISCO) и 2) энергетического переносчика (предположительно глицеральдегид-3-фосфат). Расчеты показали, что при повышении температуры константа скорости фотосинтеза, характеризующая интегральное со-

стояние фотосинтезирующего аппарата, уменьшилась в 1,7 раза, а общее дыхание возросло в 1,4 раза (рис. 26). Таким образом, показано, что при повышении температуры биота становится источником углекислого газа.

В Институте цитологии и генетики исследованы молекулярно-генетические механизмы эволюционной адаптации микроорганизмов к экстремально высоким давлениям. Для трех видов архей, проживающих на разных глубинах Мирового океана, была реконструирована их дивергенция от общего предка (рис. 27, а). Впервые показано, что адаптивная эволюция при изменении давления в зоне проживания сильно затрагивает системы трансляции и непосредственно структуры рибосом. Анализ РНК-связывающего белка Nip7 методами молекулярной динамики показал, что адаптация приводит к структурным изменениям его отдельных участков (рис. 27, б). Показано, что с помощью данных методов можно проводить *in silico* дизайн микроорганизмов, устойчивых к экстремальным условиям среды.

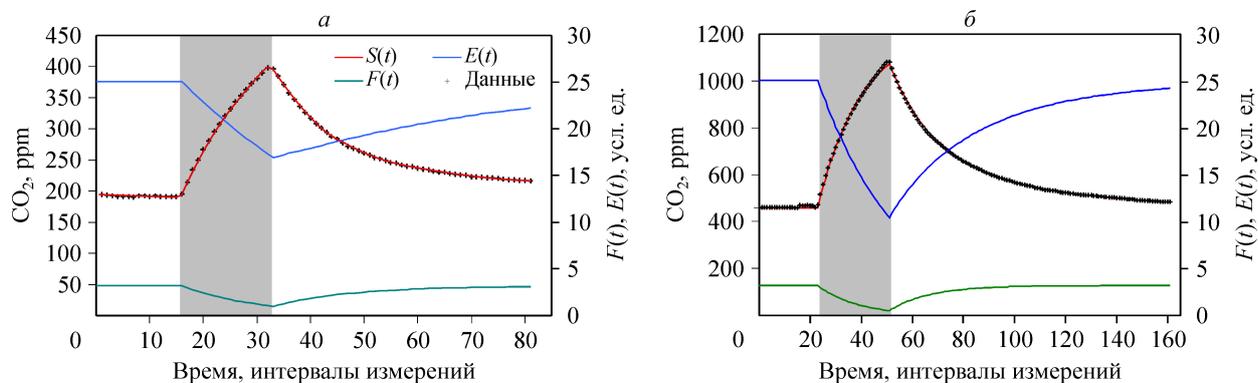


Рис. 26. Графики изменения модельных переменных и реальной концентрации CO_2 в ответ на выключение-включение света в МЭС до (а) и после (б) повышения температуры.

На графиках показаны следующие переменные модели: $S(t)$ — концентрация углекислого газа; $F(t)$ — концентрация энергетического переносчика; $E(t)$ — концентрация ключевого фермента фотосинтеза.

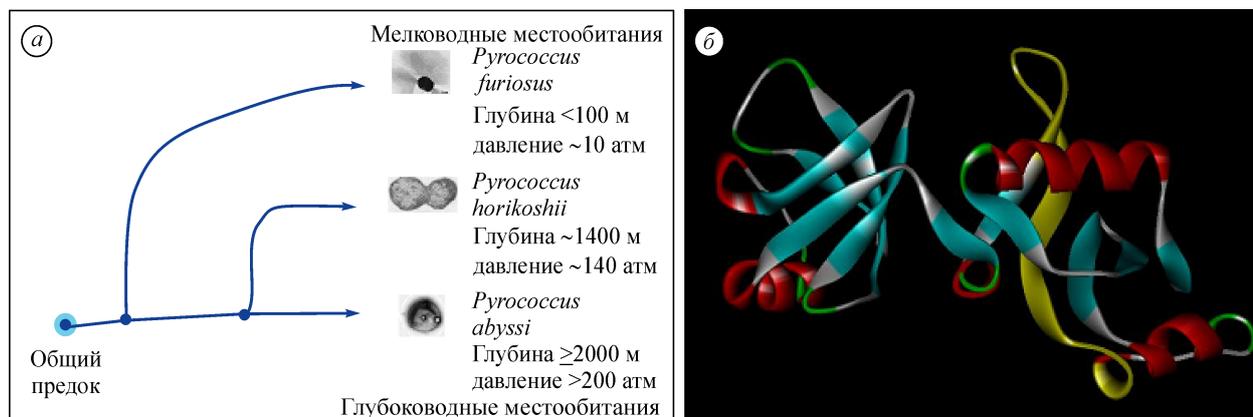


Рис. 27. Филогенетические взаимоотношения между рассматриваемыми представителями архей рода *Pyrococcus* (*P. furiosus*, *P. horikoshii* и *P. abyssi*) (а) и анализ молекулярной динамики белка Nip7 археи *P. furiosus* (б). Для архей рода *Pyrococcus* указаны глубины мест обитания и давления (а). Приведена модель третичной структуры белка Nip7: желтым цветом выделен участок, подвергавшийся наибольшим флуктуациям при давлении 100 МПа (1000 атм), красным — α -спирали, синим — β -листы, зеленым — повороты, серым — неструктурированные элементы (б).