

РОЛЬ ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКИХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ В ФОРМИРОВАНИИ ЭЛЕКТРОН-ТРАНСПОРТНОГО КОМПЛЕКСА БЕЛКОВ ПЛАСТОЦИАНИНА И ЦИТОХРОМА *f* ЦИАНОБАКТЕРИИ *P. laminosum*

Федоров В. А., Хрущев С. С., Коваленко И. Б.

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, биологический ф-т, кафедра биофизики, Россия, 119991, Москва, Ленинские горы 1, стр. 24, Телефон: +7(495) 939-02-89, e-mail: xbgth@yandex.ru

Белок-белковые взаимодействия составляют основу функционирования живой клетки. Экспериментальными [1] и вычислительными [2] методами было показано, что взаимодействие белков пластоцианина и цитохрома *f* в цианобактерии *Phormidium laminosum* не зависит от ионной силы раствора, что является отличительной особенностью данного организма. В данной работе на основе вычислительного эксперимента производится реконструкция процесса сближения молекул белков пластоцианина и цитохрома *f* цианобактерии *Phormidium laminosum* и проводится анализ электростатически выгодных взаимных ориентаций, которые белки могут претерпевать в процессе образования комплекса. Предложен оригинальный подход к реконструкции последовательности событий, происходящих при диффузионном сближении белков, с использованием методов броуновской и молекулярной динамики и иерархического кластерного анализа.

Методом броуновской динамики было получено множество электростатически выгодных взаимных расположений белков, соответствующих состоянию диффузионного захвата, и при помощи иерархического кластерного анализа были установлены наиболее типичные структуры таких комплексов. Нами был проведен сравнительный анализ электростатически выгодных взаимных расположений белков пластоцианина и цитохрома *f* из высших растений [3] и цианобактерий. Выявлены различия степени и специфики влияния дальнедействующих электростатических взаимодействий на взаимную ориентацию белков из разных организмов. Установлены возможные пути дальнейших трансформаций при образовании белками функционально активного комплекса.

Работа выполнена с использованием ресурсов суперкомпьютерного комплекса МГУ имени М.В. Ломоносова. Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, проекты 15-07-08927 и 15-04-08681.

Литература.

1. Schlarb-Ridley B.G. et al. The role of electrostatics in the interaction between cytochrome *f* and plastocyanin of the cyanobacterium *Phormidium laminosum* // *Biochemistry*, **V. 21**, 2002. p. 3279-3285.
2. Коваленко И.Б. и др. Механизмы взаимодействия белков-переносчиков электрона в фотосинтетических мембранах цианобактерий // *Доклады академии наук*, **том 440**, номер 2, 2011. с. 272-274.
3. С.С. Хрущев и др. Идентификация промежуточных состояний в процессе диффузионного сближения электронтранспортных белков пластоцианина и цитохрома *f* // *Биофизика*, **том 60**, номер 4, 2015. с. 629-638.