

ОБРАЗОВАНИЕ ЭЛЕКТРОН-ТРАНСПОРТНОГО БЕЛОК-БЕЛКОВОГО КОМПЛЕКСА ПЛАСТОЦИАНИНА И ЦИТОХРОМА *f* ВЫСШИХ РАСТЕНИЙ, ЗЕЛЕНОЙ ВОДОРОСЛИ И ЦИАНОБАКТЕРИЙ

Федоров В.А., Хрущев С.С., Устинин Д.М.¹, Коваленко И.Б., Ризниченко Г.Ю.,
Рубин А.Б.

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, биологический ф-т, кафедра биофизики, Россия, 119991, Москва, Ленинские горы 1, стр. 12, +7(495)9390289, xbgth@yandex.ru

¹Федеральный исследовательский центр Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша Российской академии наук, Россия, 125047, Москва, Миусская пл., д.4, +7(499)9781314

В данной работе с использованием комбинированного подхода броуновской и молекулярной динамики и иерархического кластерного анализа были исследованы механизмы образования комплекса пластоцианина и цитохрома *f* в высших растениях (*Spinacia oleracea* и *Brassica rapa*), зеленых микроводорослях *Chlamydomonas reinhardtii* и двух видах цианобактерий (*Phormidium laminosum* и *Nostoc* sp.). В высших растениях и зеленых водорослях электростатические взаимодействия удерживают молекулу пластоцианина вблизи гема цитохрома *f*. При последующем вращении молекулы пластоцианина вокруг одноточечной электростатической связи с цитохромом *f* атом меди пластоцианина приближается к гему цитохрома *f*, образуя устойчивую конфигурацию, в которой молекула цитохрома *f* не претерпевает существенных конформационных изменений. В случае цианобактерии *Nostoc*, молекула пластоцианина приближается к цитохрому *f* в случайной ориентации, но с направленными друг к другу активными центрами (head-on ориентация), а стабилизация комплекса пластоцианина с цитохромом *f* сопровождается конформационными изменениями петли G188E189D190 цитохрома *f*. Для белков цианобактерии *P. laminosum* электростатическая предварительная ориентация молекул при сближении не была обнаружена, что указывает на то, что при образовании комплексов превалирует случайное (броуновское) движение, а не дальнедействующие электростатические взаимодействия. Мы показали, что, несмотря на структурное сходство исследуемых электрон-транспортных белков в разных фотосинтезирующих организмах, сложность молекулярных механизмов образования комплексов возрастает в следующей последовательности: вегетативные клетки и акинеты цианобактерий - гетероцисты цианобактерий - зеленые водоросли - цветковые растения.

Работа выполнена с использованием оборудования Центра коллективного пользования сверхвысокопроизводительными вычислительными ресурсами МГУ имени М.В. Ломоносова. Работа поддержана грантами РФФИ № 17-04-00676 и № 18-07-01219.