

МОЛЕКУЛЯРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЦИТОХРОМНОГО bc_1 КОМПЛЕКСА С ЦИТОХРОМОМ c

Васюченко Е.П., Федоров В.А., Абатурова А.М., Устинин Д.М.¹, Коваленко И.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

Цитохром c является подвижным переносчиком электронов в дыхательной цепи митохондрий, который транспортирует электрон от цитохромного bc_1 комплекса к цитохром c оксидазе. Цитохром c представляет собой растворимый белок, расположенный в межмембранном пространстве митохондрий, имеет в качестве функциональной группы гем типа c , соединенный с белковой частью с помощью двух тиоэфирных связей через остатки цистеина.

В настоящее время известна структура комплекса между цитохромным bc_1 комплексом и цитохромом c только для организма *Saccharomyces cerevisiae*. Мы построили модель взаимодействия этих белков, выделенных из млекопитающих организмов *Equus caballus* и *Bos taurus* с помощью комбинированного метода броуновской и молекулярной динамики и кластерного анализа.

Нами была рассчитана броуновская динамика взаимодействия цитохрома c с цитохромным bc_1 комплексом с помощью программы ProKSim с использованием структур белков, полученных из *Saccharomyces cerevisiae*, в результате чего было получено 20000 энергетически выгодных взаимных расположений с энергией электростатического взаимодействия более $8kT$. С помощью метода кластерного анализа были выявлены наиболее типичные конформации диффузионно-столкновительного комплекса.

С использованием метода полноатомной молекулярной динамики был выявлен механизм перехода полученных диффузионно-столкновительных комплексов к стабильному финальному комплексу, в котором расстояние между кофакторами белков пригодно для передачи электрона. Финальные комплексы мы сравнивали с исходным взаимным расположением белков в экспериментально полученном комплексе (PDB ID: 3CX5, X-RAY).

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