

ИССЛЕДОВАНИЕ КОНФОРМАЦИОННЫХ ПЕРЕСТРОЕК ГЕМА ЦИТОХРОМА С И С₁ В ПРОЦЕССЕ ОБРАЗОВАНИЯ КОМПЛЕКСА МЕТОДАМИ МОЛЕКУЛЯРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Васюченко Е.П., Федоров В.А., Абатурова А.М., 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, vasyuchenko.katya@gmail.com

Цитохром *c* является подвижным переносчиком электронов в дыхательной цепи митохондрий, который транспортирует электрон от цитохромного *bc₁* комплекса к цитохром *c* оксидазе. От конформации гема в цитохроме *c* зависит скорость передачи электрона в комплексе и, соответственно, эффективность электрон-транспортной цепи.

В нашей работе мы использовали отдельные структуры цитохромов *c* и *c₁* *Bos taurus*. Мы получили набор диффузионно-столкновительных комплексов методом броуновской динамики с энергией электростатического притяжения не менее 8 кТ с помощью программы ProKSim [1], который анализировали с помощью метода кластерного анализа. Затем мы описали процесс образования финальных комплексов из центральных структур полученных кластеров с помощью метода молекулярной динамики в программе GROMACS[2]. Также было проведено молекулярное моделирование отдельных белков цитохрома *c* и *c₁*.

Для определения и количественного описания конформации гема был использован подход, основанный на работе Jetzen W. et al. (1997) [3]. С помощью этого подхода в каждый момент времени рассчитывались вклады отклонений от эталонной структуры гема по 12 координатам, соответствующим медленным нормальным модам. Далее мы наблюдали за изменением этих вкладов и влиянии их друг на друга.

В результате данных исследований, оказалось, что гемы цитохромов *c* и *c₁* ведут себя по-разному в зависимости от того, сформирован комплекс этими белками, или нет. Кроме этого, было отмечено взаимное изменение конформации гемов, в ситуации, когда цитохромы образуют комплекс.

Исследование выполнено в рамках научного проекта государственного задания МГУ №121032500060-0 с использованием оборудования Центра коллективного пользования сверхвысокопроизводительными вычислительными ресурсами МГУ имени М.В. Ломоносова.

1. Хрущев С. С. и др. Моделирование белок-белковых взаимодействий с применением программного комплекса многочастичной броуновской динамики ProKSim //Компьютерные исследования и моделирование. – 2013. – Т. 5. – №. 1. – С. 47-64.

2. Abraham M. J. et al. GROMACS: High performance molecular simulations through multi-level parallelism from laptops to supercomputers //SoftwareX. – 2015. – Т. 1. – С. 19-25.

3. Jentzen W., Song X. Z., Shelnut J. A. Structural characterization of synthetic and protein-bound porphyrins in terms of the lowest-frequency normal coordinates of the macrocycle //The Journal of Physical Chemistry B. – 1997. – Т. 101. – №. 9. – С. 1684-1699.