

МОЛЕКУЛЯРНАЯ МОДЕЛЬ ФОТОСИСТЕМЫ 1 ВЫСШИХ РАСТЕНИЙ¹

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

Московский государственный университет им. М.В.Ломоносова, Биологический факультет, каф. биофизики, Россия, 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 12, styx@biophys.msu.ru

На основе размещенной в базе данных RCSB PDB структуры суперкомплекса фотосистемы 1 гороха (PDB ID: 5L8R [1]) создана молекулярная модель фотосистемы 1 высших растений. Проведено сопоставление структуры белковых цепей 5L8R с соответствующими аминокислотными последовательностями и выявлены не разрешенные по данным рентгеноструктурного анализа плохо структурированные участки цепей. При создании модели недостающие промежуточные участки белковых цепей добавлены в структуры с помощью программного обеспечения MODELLER [2]. Недостающие атомы в молекулах кофакторов были добавлены с помощью программного обеспечения PyMOL (Schrödinger, LLC). В качестве силового поля для построения модели было выбрано поле CHARMM36m [3], объединенное с полем CGenFF 4.4 [4]. Параметры для хлорофилла *a* взяты из работы [5]. Топология для хлорофилла *b* построена на основе топологии хлорофилла *a* и параметров альдегидной группы бензальдегида из CHARMM36. Параметры для бета-каротина и виолаксантина получены с помощью автоматизированной процедуры определения параметров поля CGenFF [6, 7]. Параметры для лютеина и зеаксантина взяты из [8]. Набор параметров для филлохинона был получен на основе параметров нафтохинонового кольца менахинона из [9] и параметров алифатической цепи фитила из поля CHARMM36. Параметры для моно- и дигалактозилдиацилглицерола были получены с помощью автоматизированной системы определения параметров гликолипидов, входящей в программный комплекс CHARMM-GUI [10, 11]. Для дипальмитоилфосфатидилглицерола использовали параметры из силового поля CHARMM36. Параметры для железо-серных кластеров взяты из [12]. Параметры для всех типов молекул были преобразованы в предназначенный для использования программным комплексом GROMACS [13] формат. Также были созданы наборы правил для определения координат отсутствующих в рентгеноструктурных данных атомов водорода.

Литература

1. Mazor et al., 2017, DOI: 10.1038/nplants.2017.14
2. Webb and Sali, 2016, DOI: 10.1002/cpbi.3
3. Huang et al., 2016, DOI: 10.1038/nmeth.4067
4. Vanommeslaeghe et al., 2010, DOI: 10.1002/jcc.21367
5. Adam et al., 2018, DOI: 10.1002/jcc.24918
6. Vanommeslaeghe and MacKerell, 2012, DOI: 10.1021/ci300363c
7. Vanommeslaeghe et al., 2012, DOI: 10.1021/ci3003649
8. Grudzinski et al., 2017, DOI: 10.1038/s41598-017-10183-7
9. Teixeira and Arantes, 2019, DOI: 10.1039/C9RA01681C
10. Jo et al., 2008, DOI: 10.1002/jcc.20945
11. Lee et al., 2019 DOI: 10.1021/acs.jctc.8b01066
12. Chang and Kim, 2009, DOI: 10.1021/ct800342w
13. Abraham et al., 2015, DOI: 10.1016/j.softx.2015.06.001

¹ Исследование выполнено в рамках научного проекта государственного задания МГУ №121032500060-0 при частичной поддержке гранта РФФИ № 19-04-00999.