

РОЛЬ ГИДРОФОБНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ В ПРОЦЕССЕ ФОРМИРОВАНИЯ КОМПЛЕКСА БЕЛКОВ ПЛАСТОЦИАНИНА И ЦИТОХРОМА С6 С ЦИТОХРОМОМ F В ЦИАНОБАКТЕРИЯХ И ЗЕЛЕННЫХ ВОДОРОСЛЯХ

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. 12, +7(495)9390289, xbgth@yandex.ru

Взаимодействия между белками лежат в основе большинства биологических процессов. Образование белкового комплекса это сложный многостадийный процесс требующий учета множества факторов, таких как дальнедействующие электростатические взаимодействия между поверхностями белков, геометрическая и химическая комплементарность областей связывания, молекулярная подвижность в белок-белковом интерфейсе, гидрофобные взаимодействия. Ранее нами был разработан оригинальный подход, позволяющий, благодаря совместному использованию методов броуновской и молекулярной динамики, предсказать структуру образовавшегося комплекса и молекулярные механизмы, приведшие к его образованию. В данном подходе метод броуновской динамики используется для моделирования образования двумя белками столкновительного комплекса с учетом процессов диффузии и электростатических взаимодействий, а молекулярная динамика используется для моделирования трансформации предварительного комплекса в финальный с учетом подвижности атомов, конформационных изменений и молекул растворителя.

Для выявления принципиальных физико-химических взаимодействий, лежащих в основе функционирования исследуемых белков, нами были рассчитаны матрицы контактов аминокислот одного белка с аминокислотами другого белка и их изменение во времени. Данный подход позволил нам выявить роль гидрофобных взаимодействий в образовании комплекса белков пластоцианина и цитохрома с6 с цитохромом f в цианобактериях и зеленых водорослях и показать, что их роль в формировании комплекса меняется вместе с эволюционными изменениями в белковых последовательностях.

Работа выполнена с использованием оборудования Центра коллективного пользования сверхвысокопроизводительными вычислительными ресурсами МГУ имени М.В. Ломоносова при поддержке гранта Президента Российской Федерации для государственной поддержки молодых российских ученых - кандидатов наук МК-2931.2022.1.4.