

# МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ФОТОСИСТЕМЫ I С ПЛАСТОЦИАНИНОМ И ЦИТОХРОМОМ C6 МЕТОДОМ БРОУНОВСКОЙ ДИНАМИКИ

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

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова

Пластоцианин и цитохром c6 — белки-переносчики электронов в электронтранспортной цепи цианобактерий и хлоропластов, осуществляющие перенос электрона от цитохрома f цитохром-b6f-комплекса на фотосистему I.

Мы полагаем, что взаимодействие белка – подвижного переносчика электронов с мультиферментным комплексом можно условно разделить на несколько этапов [1]. Предполагается, что на первом этапе взаимодействия белок-переносчик диффундирует под действием случайных броуновских сил и электростатических взаимодействий с фотосистемой. Результатом диффузии является формирование столкновительного комплекса, который затем может перейти в финальный комплекс, в котором возможен туннельный перенос электрона. В данной работе мы исследуем процесс формирования столкновительного комплекса белков-переносчиков с фотосистемой I методом броуновской динамики в программе ProKSim [2].

Для моделирования были выбраны белки *Chlamydomonas reinhardtii*. Для каждого белка-переносчика и каждого порогового значения энергии (4кТ, 6кТ, 8кТ) произведено по 10000 запусков динамики. Полученные структуры электростатических столкновительных комплексов далее подвергались кластерному анализу. Анализировалась подвижность структур, частоты контактов и кинетика формирования комплекса. Центральные структуры кластеров в дальнейшем могут быть использованы для моделирования формирования финального комплекса методом молекулярной динамики.

## Литература.

1. V. A. Fedorov, I. B. Kovalenko, S. S. Khruschev, D. M. Ustinin, T. K. Antal, G. Yu. Riznichenko and A. B. Rubin. "Comparative analysis of plastocyanin-cytochrome f complex formation in higher plants, green algae and cyanobacteria", *Physiologia Plantarum*, vol. 166, no. 1, pp. 320-335, 2019.
2. В. А. Федоров, С. С. Хрущев, И. Б. Коваленко. Анализ траекторий броуновской и молекулярной динамики для выявления механизмов белок-белковых взаимодействий // *Компьютерные исследования и моделирование*. — 2023. — Т. 15, № 3. — С. 723–738.