

## ОБРАЗОВАНИЕ ЭЛЕКТРОН-ТРАНСПОРТНОГО БЕЛОК-БЕЛКОВОГО КОМПЛЕКСА ПЛАСТОЦИАНИНА И ЦИТОХРОМА f ВЫСШИХ РАСТЕНИЙ И ЦИАНОБАКТЕРИЙ

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

Нами были проведены серии вычислительных экспериментов с использованием метода броуновской динамики для исследования диффузионно-столкновительных комплексов электрон-транспортных белков цитохрома f и пластоцианина из двух видов цианобактерий (*Phormidium* и *Nostoc*) и высших растений.

Для цианобактериальных белков образование комплекса пластоцианина и цитохрома f с энергией электростатического взаимодействия 4 кТ или более является относительно редким событием ( $k_{on}$  меньше  $10^7 \text{ M}^{-1} \text{ c}^{-1}$ ). Несмотря на достижение белками пластоцианином и цитохромом f из *Phormidium* энергетически выгодных взаимных расположений, окислительно-восстановительные центры белков (гем цитохрома f и атом меди пластоцианина) при этом всегда находятся на большом расстоянии, на котором перенос электронов маловероятен. Это означает, что электростатически выгодные столкновительные комплексы не являются функционально-активными. Пластоцианин из *Nostoc*, в отличие от предыдущего случая, почти всегда связывается с цитохромом f непосредственно в области расположения гема последнего в двух преобладающих ориентациях (43% и 40% всех отобранных структур).

Для белков из высших растений образование комплексов с энергией электростатического взаимодействия 4 кТ или выше происходит гораздо чаще ( $k_{on}$  превышает  $10^9 \text{ M}^{-1} \text{ c}^{-1}$ ). Взаимные ориентации представляют собой одну равномерно плотную группу, в которой пластоцианин расположен вблизи гема цитохрома f. Однако, пластоцианин сохраняет заметную вращательную подвижность вокруг своего центра масс. Мы увеличили значение электростатической энергии притяжения белков, при которой отбираются структуры столкновительных комплексов, до 8 кТ, (при этом  $k_{on} > 10^7 \text{ M}^{-1} \text{ c}^{-1}$  довольно высока для этой энергии взаимодействия), при этом могут быть выявлены две различные группы ориентаций пластоцианина. В 57% взаимных расположений имеется гибкое одноточечное соединение, образованное противоположно заряженными участками двух белков, что дает возможность перехода в функционально активное состояние за счет поворота относительно этой связи без нарушения электростатического связывания. В оставшихся структурах перенос электрона затруднен из-за большого расстояния между кофакторами, и эти структуры не могут быть легко трансформированы в функционально-активное состояние из-за высокого энергетического барьера.

Работа выполнена с использованием оборудования Центра коллективного пользования сверхвысокопроизводительными вычислительными ресурсами МГУ имени М.В. Ломоносова. Работа поддержана грантами РФФИ № 15-07-08927 и № 15-04-08681.