

# ИССЛЕДОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ МЕЖДУ ПЛАСТОЦИАНИНОМ И ФОТОСИСТЕМОЙ 1 ГОРОХА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МОЛЕКУЛЯРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Вольхин И.А., Федоров В.А.<sup>1</sup>, Хрущев С.С.<sup>1</sup>, Коваленко И.Б.<sup>1</sup>

Факультет биоинженерии и биоинформатики, Московский Государственный  
Университет им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия

<sup>1</sup>Биологический факультет, Московский Государственный Университет им. М.В.  
Ломоносова, Москва, Россия

Пластоцианин – белок-переносчик электронов в электрон-транспортной цепи цианобактерий и хлоропластов, осуществляющий перенос электронов от цитохрома *f* цитохром-*b6f*-комплекса к фотосистеме 1. В данной работе мы изучаем образование белок-белкового комплекса между пластоцианином и фотосистемой 1 *Pisum sativum* с использованием молекулярного моделирования. Мы предполагаем, что на первом этапе белок-переносчик диффундирует под действием случайных сил и электростатических взаимодействий. Результатом диффузии является образование столкновительного комплекса, который затем может перейти в финальный комплекс, в котором возможен перенос электрона [1]. Формирование столкновительного комплекса мы моделировали с помощью метода броуновской динамики, в котором белковые молекулы представляют из себя твёрдые тела, движущиеся сквозь сплошную среду растворителя [2]. Затем мы использовали структуру столкновительного комплекса в качестве исходной структуры для моделирования образования финального комплекса с помощью метода молекулярной динамики. Мы провели три симуляции длительностью до 2 мкс и в двух случаях из трех финальный комплекс сформировался. Мы предполагаем, что на первом этапе столкновительный комплекс образуется за счет электростатического взаимодействия между пластоцианином и субъединицей *PsaF* фотосистемы 1. Пластоцианин затем может поворачиваться вокруг электростатического контакта и образовать финальный комплекс за счет гидрофобных взаимодействий с фотосистемой 1. Мы предполагаем, что ключевыми аминокислотными остатками в этом процессе являются Q663, Q666 и S662 субъединицы *PsaA*, L626, Q608 и S629 субъединицы *PsaB* и P36, P86, F35 и L12 пластоцианина.

## Литература.

1. Fedorov VA, Kovalenko IB, Khrushev SS, Ustinin DM, Antal TK, Riznichenko GY, et al. Comparative analysis of plastocyanin–cytochrome *f* complex formation in higher plants, green algae and cyanobacteria. *Physiol Plant* (2019), <https://doi.org/10.1111/ppl.12940>.
2. Kovalenko, I.B. et al. Computer simulation of protein-protein association in photosynthesis (2011), <https://doi.org/10.1051/mmnp/20116704>