

**Исследование взаимодействия пластоцианина с фотосистемой 1 гороха
методами молекулярного моделирования**

Научный руководитель – Фёдоров Владимир Андреевич

Вольхин Илья Александрович

Студент (специалист)

Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, Факультет
биоинженерии и биоинформатики, Москва, Россия

E-mail: ilyavolkhin2@gmail.com

Пластоцианин является белком-переносчиком электронов в электрон-транспортной цепи цианобактерий и хлоропластов, осуществляя перенос электронов от цитохрома *f* цитохром-*b6f*-комплекса к фотосистеме 1. В данной работе мы изучаем формирование белкового комплекса между пластоцианином и фотосистемой I гороха *Pisum sativum* с использованием методов молекулярного моделирования. Мы предполагаем, что сначала белки диффундируют под влиянием случайных сил и электростатических взаимодействий. Результатом диффузии является формирование столкновительного комплекса, который затем может превратиться в финальный комплекс, в котором возможен перенос электронов [1]. Мы моделировали формирование столкновительного комплекса с использованием метода броуновской динамики, в котором молекулы белков представляют собой твердые тела, движущиеся в непрерывной среде растворителя [2]. Затем мы использовали структуры столкновительных комплексов в качестве начальных структур для моделирования формирования финального комплекса с использованием молекулярной динамики. Для первой структуры столкновительного комплекса мы провели три симуляции длительностью до 2 мкс, и в одном случае из трех финальный комплекс был сформирован. Для второй структуры столкновительного комплекса мы провели симуляцию длительностью 1.75 мкс, и наблюдали формирование непродуктивного комплекса. Мы предполагаем, что на первом этапе столкновительный комплекс формируется благодаря электростатическому взаимодействию между пластоцианином и субъединицей PsaF фотосистемы 1. Затем пластоцианин может вращаться вокруг электростатического контакта и формировать финальный комплекс благодаря гидрофобным взаимодействиям. Мы предполагаем, что ключевыми аминокислотными остатками для этого процесса являются Q663, Q666 и S662 субъединицы PsaA, L626, Q608 и S629 субъединицы PsaB, а также P36, P86, F35 и L12 пластоцианина. Роль данных аминокислот подтверждается как предыдущими экспериментальными исследованиями, так и проведенным нами биоинформатическим анализом.

Источники и 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>