

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ БЕЛКОВ В ФОТОСИНТЕТИЧЕСКОЙ МЕМБРАНЕ

Коваленко И.Б., Князева О.С., Ризниченко Г.Ю., Рубин А.Б.

Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова
Россия, 119991, г. Москва, Ленинские Горы,
Тел.: (495) 939-02-89, факс: (495) 939-11-15,
E-mail: kovalenko78@mail.ru

Образование временных белок-белковых комплексов в энергопреобразующих мембранах хлоропластов и митохондрий является необходимым этапом процессов трансформации энергии, сопряженных с электронным транспортом. Для рассмотрения взаимодействия белков в фотосинтетической мембране мы применили разработанный нами метод прямого компьютерного многочастичного моделирования. Этот метод позволяет описывать взаимодействие подвижных белков со встроенными в мембраны мультиферментными комплексами в сложном интерьере клетки. Метод был применен для моделирования взаимодействия белков пластоцианина и цитохрома *f* в растворе [1] и тилакоиде хлоропласта [2], при учете электрического поля тилакоидной мембраны [3]. Также было изучено образование комплекса фотосистемы 1 с пластоцианином и ферредоксином в растворе [4]. На основе этих моделей была построена модель направленного переноса электрона белком пластоцианином от цитохромного *b_f* комплекса на фотосистему 1 в люминальном пространстве тилакоида с учетом неравномерного распределения белковых комплексов на мембране. Проведено сравнение полученных характерных времен реакций с экспериментальными данными, полученными на изолированном хлоропласте шпината [5]. На модели показано, что кривые восстановления P700 и окисления цитохрома *f* имеют две фазы с характерными временами порядка 30 мкс и 300 мкс (P700) и 240 мкс и 1000 мкс (цитохром *f*) соответственно, и кинетические кривые окисления цитохрома *f* имеют 25 мкс лаг-период, что согласуется с экспериментальными данными.

Литература.

1. Kovalenko I.B. et al. Direct simulation of plastocyanin and cytochrome *f* interactions in solution // *Phys. Biol.* **Vol. 3**, 2006. Pp. 121–129.
2. Коваленко И.Б. и др. Компьютерное моделирование образования комплекса между пластоцианином и цитохромом *f* в люмене тилакоида // *Биофизика* **Том 53**, Номер 2, 2008. Стр. 261-270.
3. Князева О.С. и др. Многочастичная модель диффузии и взаимодействия пластоцианина с цитохромом *f* в электростатическом поле фотосинтетической мембраны // *Биофизика* **Том 55**, Номер 2, 2010. Стр. 259–268.
4. Kovalenko I.B. et al. Computer simulation of interaction of photosystem 1 with plastocyanin and ferredoxin // *BioSystems* **Vol. 103**, 2011. Pp. 180-187.
5. Haehnel W., Propper A., Krause H. Evidence for complexed plastocyanin as the immediate electron donor of P-700 // *Biochim. Biophys. Acta.* **Vol. 593**, 1980. Pp. 384-399.