

# ПРЯМОЕ КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ pH СРЕДЫ И РЕДОКС-СОСТОЯНИЯ ПЛАСТОЦИАНИНА И ЦИТОХРОМА f НА КОНСТАНТУ ИХ СВЯЗЫВАНИЯ

Абатурова А.М., Громов П.А.<sup>1</sup>, Коваленко И.Б., Ризниченко Г.Ю., Грачев Е.А.<sup>1</sup>

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова,  
Биологический ф-т, каф. Биофизики,  
Россия, 119992, Москва, Ленинские горы, МГУ,  
Тел. (095)9390289, e-mail: abaturova@list.ru

<sup>1</sup>Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Физический ф-т,  
Россия, 119992, Москва, Ленинские горы, МГУ

Транспорт электрона подвижным белком-переносчиком пластоцианином (Pc) в люмене тилакоида от цитохрома f цитохромного b<sub>6</sub>f комплекса к фотосистеме 1 является одной из ключевых стадий электрон-транспортной цепи фотосинтеза. Pc высших растений является небольшим (10 кДа) отрицательно заряженным белком, в качестве редокс центра несет атом меди. Цитохром f является субъединицей цитохромного b<sub>6</sub>f комплекса, в качестве редокс центра несет гем. Внемембранная часть цитохрома f (cyt<sub>f</sub>) отрицательно заряжена, но в области связывания Pc имеет положительный заряд. Известно, что в образовании комплекса между Pc и cyt<sub>f</sub> основную роль играют электростатические взаимодействия.

Ранее [1] нами была разработана модель прямого компьютерного моделирования образования комплекса между двумя белками. Были оценены значения параметров модели для образования комплекса между окисленным Pc и восстановленным cyt<sub>f</sub> при pH раствора 7. В данной работе мы изучаем влияние изменения редокс-состояния Pc и cyt<sub>f</sub> на константу их связывания. Моделирование показало, что при pH раствора 7 и ионной силе 100 мМ константа связывания восстановленного Pc и окисленного cyt<sub>f</sub> примерно в 1.5 раза выше, чем для окисленного Pc и восстановленного cyt<sub>f</sub>. При изменении pH раствора (4-10 единиц) и ионной силы (50-300 мМ) константа связывания восстановленного Pc и окисленного cyt<sub>f</sub> выше или равна константе связывания окисленного Pc и восстановленного cyt<sub>f</sub>.

Данный результат связан с тем, что у окисленного cyt<sub>f</sub> вокруг области связывания Pc расположен более высокий положительный электростатический потенциал, чем у восстановленного cyt<sub>f</sub>. А вокруг восстановленного Pc более высокий отрицательный потенциал, чем вокруг окисленного Pc. Данный результат показывает, что при моделировании транспорта электрона Pc от цитохромного b<sub>6</sub>f комплекса к фотосистеме 1 необходимо учитывать изменение электростатического потенциала вокруг Pc и cyt<sub>f</sub> при изменении их редокс-состояния.

## Литература.

1. Kovalenko I. B., Abaturova A. M., Gromov P. A., Ustinin D. M., Grachev E. A., Riznichenko G. Yu., Rubin A. B. Direct simulation of interaction of plastocyanin and cytochrome f in solution // Phys. Biol. Vol. 6, 2006. P. 121-129.