

МОЛЕКУЛЯРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ОБРАЗОВАНИЕ КОМПЛЕКСОВ БЕЛКОВ ЦИТОХРОМА *c6* С ЦИТОХРОМОМ *f* ИЗ ЦИАНОБАКТЕРИЙ *NOSTOC*, *PHORMIDIUM LAMINOSUM* И ЗЕЛЕННОЙ ВОДОРОСЛИ *CHLAMYDOMONAS*

Федоров В.А., Хрущев С.С., Коваленко И.Б., Ризниченко Г.Ю.

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

Образование короткоживущих белок-белковых комплексов – это сложный многостадийный процесс: в результате диффузии белки образуют столкновительные комплексы, которые затем могут трансформироваться в финальный комплекс, пройдя при этом через ряд метастабильных состояний, или распасться. Детальное экспериментальное изучение таких процессов затруднено тем, что они происходят на существенно различных пространственных и временных масштабах и характеризуются высокой сложностью. В настоящем исследовании предлагается использовать методы молекулярного моделирования для полного детального изучения процессов образования белок-белковых комплексов цитохрома *c6* и цитохрома *f* в цианобактериях *Nostoc*, *Phormidium laminosum* и зеленой водоросли *Chlamydomonas*. В данной работе использовались комбинированный подход броуновской и молекулярной динамики и иерархический кластерный анализ.

Несмотря на достижение белками цитохрома *c6* и цитохромом *f* из *Phormidium* энергетически выгодных взаимных расположений, окислительно-восстановительные центры белков (гемы цитохрома *f* и цитохрома *c6*) при этом всегда находятся на большом расстоянии, на котором перенос электронов маловероятен. Это означает, что электростатически выгодные столкновительные комплексы не являются функционально-активными. Для цианобактериальных белков из *Nostoc* образование комплекса цитохрома *c6* и цитохрома *f* с энергией электростатического взаимодействия $4 kT$ или более является довольно частым событием, и, в отличие от *Phormidium*, в более 26% случаев цитохром *c6* связывается с цитохромом *f* непосредственно вблизи области расположения гема последнего в одной из трех преобладающих ориентациях. Образование диффузионно-столкновительных комплексов в зеленой водоросли *Chlamydomonas* происходит также часто как и в цианобактерии *Nostoc*, однако белки могут достигать еще больших значений энергии (более $8 kT$) и в трети случаев образуют продуктивные комплексы.

Работа выполнена с использованием оборудования Центра коллективного пользования сверхвысокопроизводительными вычислительными ресурсами МГУ имени М.В. Ломоносова. Исследование выполнено в рамках научного проекта государственного задания МГУ №121032500060-0 при частичной поддержке грантами РФФИ № 20-04-00465 и 19-04-00999.