

РОЛЬ СРЕДЫ ОБИТАНИЯ ОРГАНИЗМА В КИНЕТИКЕ СВЯЗЫВАНИЯ МОЛЕКУЛ БЕЛКОВ ПЛАСТОЦИАНИНА И ЦИТОХРОМА *F* ЦИАНОБАКТЕРИЙ *SYNECHOCOCCUS* RCC307 И *SYNECHOCOCCUS* LACUSTRIS

Федоров В.А., Орехов Ф.С.¹, Хрущев С.С., Устинин Д.М.², Коваленко И.Б.

Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, 119992, г. Москва,
Ленинские горы, 1 стр. 24

¹Московский физико-технический институт, Россия, 141701, Московская область, г.
Долгопрудный, Институтский пер., 9

²Федеральный исследовательский центр Институт прикладной математики им. М.В.
Келдыша Российской академии наук, Россия, 125047, Москва, Миусская пл., д.4

Считается, что адаптация морского прокариота для жизни в пресноводных средах или наоборот является требующим эволюционных изменений сложным процессом. В работе (P. J. Cabello-Yeves et al. 2019) экспериментально были отмечены изменения на уровне аминокислотного состава и pI для различных белков прокариот, связанные с различиями в средах обитания организма. Физиологическое объяснение таких изменений в pI и электростатических поверхностных потенциалах еще не известно. Однако эти изменения могут отражать различия в мембранной биоэнергетике, обусловленные отсутствием значительных концентраций Na⁺ в большинстве пресноводных местообитаний. Ранее нами (V.A. Fedorov et al. 2019) было показано существенное различие механизмов образования комплекса для пары белков пластоцианина и цитохрома *f* у гетероцистной цианобактерии *Nostoc* и безгетероцистной *Phormidium laminosum* при общей схожести третичной структуры самих белков, а также влияние изменения ионной силы на скорость образования комплекса (И.Б. Коваленко и др. 2011).

Целью данной работы является исследование влияния изменений, связанных со сменой среды обитания организма, в аминокислотных последовательностях молекул белков пластоцианина и цитохрома *f* цианобактерий, на кинетику их связывания. В качестве модельных объектов были выбраны электрон-транспортные белки пластоцианин и цитохром *f* двух видов цианобактерий с различной средой обитания: морская *Synechococcus* RCC307 и пресноводная *Synechococcus lacustris*. Конформации белков были получены с использованием построения структур по гомологии на основании их аминокислотной последовательности. Для моделирования взаимодействия данной пары белков нами используется метод броуновской динамики, в котором белки рассматриваются как твердые тела в неявно заданном растворителе и моделируется их движение с учетом электростатических взаимодействий между ними. Вычислительные эксперименты проводились при различных значениях ионной силы раствора для оценки влияния среды на константу скорости образования комплексов.

Работа выполнена с использованием оборудования Центра коллективного пользования сверхвысокопроизводительными вычислительными ресурсами МГУ имени М.В. Ломоносова. Работа поддержана грантами РФФИ № 18-07-01219, 19-04-00999.