

## ИЗМЕНЕНИЯ СТРУКТУРНОЙ ОРГАНИЗАЦИИ ЦИТОХРОМА $c_1$ В ПРОЦЕССЕ ОБРАЗОВАНИЯ И РАСПАДА КОМПЛЕКСА МЕЖДУ ЦИТОХРОМАМИ $c$ И $c_1$

Васюченко Е.П., Федоров В.А., Абатурова А.М., Коваленко И.Б.

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, биологический ф-т, кафедра биофизики, Россия, 119991, Москва, Ленинские горы 1, стр. 12 +7(495)9390289  
vasyuchenko.katya@gmail.com

Цитохром  $c$  является подвижным переносчиком электронов в дыхательной цепи митохондрий, который транспортирует электрон от цитохромного  $bc_1$  комплекса к цитохром  $c$  оксидазе. В настоящее время известна структура комплекса между цитохромным  $bc_1$  комплексом и цитохромом  $c$  только для организма *Saccharomyces cerevisiae*.

В нашей работе мы использовали отдельные структуры цитохромов  $c$  и  $c_1$  *Bos taurus*. Мы получили набор диффузионно-столкновительных комплексов методом броуновской динамики с энергией электростатического взаимодействия не менее -8 кТ с помощью программы ProKSim [1], который анализировали с помощью метода кластерного анализа. Затем мы описали процесс образования финальных комплексов из центральных структур полученных кластеров с помощью метода молекулярной динамики в программе GROMACS [2].

Мы использовали две известные структуры цитохрома  $c_1$ , различающиеся пространственной организацией петлевого участка и  $\alpha$ -спирали (V168-G185), но имеющие одинаковую аминокислотную последовательность. Структура этого участка сильно влияет на распределение электростатического потенциала на поверхности цитохрома  $c_1$ . В процессе моделирования комплексообразования были обнаружены существенные различия в способности образовывать стабильный финальный комплекс, в котором возможна передача электрона между функциональными группами исследуемых белков, обусловленные структурой участка V168-G185.

Для изучения влияния этого участка на образование и распад комплекса между данными белками использовался метод метадинамики, с помощью анализа главных компонент были получены координаты реакции образования и расплетения  $\alpha$ -спирали в участке V168-G185.

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

### Литература.

1. Хрущев С. С. и др. Моделирование белок-белковых взаимодействий с применением программного комплекса многочастичной броуновской динамики ProKSim //Компьютерные исследования и моделирование. – 2013. – Т. 5. – №. 1. – С. 47-64.
2. Abraham M. J. et al. GROMACS: High performance molecular simulations through multi-level parallelism from laptops to supercomputers //SoftwareX. – 2015. – Т. 1. – С. 19-25.