

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ КОМПЛЕКСА ФОТОСИСТЕМЫ 1 С БЕЛКАМИ ПЛАСТОЦИАНИНОМ И ФЛАВОДОКСИНОМ

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

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Биологический ф-т, каф. Биофизики, Россия, 119991, Москва, Ленинские горы, МГУ, Тел. (495)9390289

<sup>1</sup>Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Физический ф-т.

Важнейшую роль в фотосинтезе играют взаимодействия фотосинтетических реакционных центров с донорными и акцепторными компонентами. Для фотосистемы 1 как донором, так и акцептором служат малые белковые молекулы. Донором у высших растений является пластоцианин (Pc) и цитохром  $c_6$  (cyt  $c_6$ ) у цианобактерий и водорослей, а акцептором у высших растений служит ферредоксин (Fd) и флаводоксин (Fld) у цианобактерий и водорослей. Объектами нашего моделирования явились пластоцианин, флаводоксин и мультибелковый комплекс фотосистемы 1 (PSI) со связанным светособирающим комплексом LHCI.

Пластоцианин и флаводоксин – это небольшие водорастворимые медьсодержащие белки, синтезирующиеся у всех высших растений и некоторых зеленых водорослей и цианобактерий. Построены модели связывания белков флаводоксина и пластоцианина с комплексом фотосистемы 1, учитывающие их сложную форму и электростатические взаимодействия. Модели воспроизводят процессы, предшествующие стабилизации комплекса: случайное сближение молекул за счет броуновского движения, дальнейшее сближение и взаимную ориентацию за счет электростатических взаимодействий. Уже потом в реальных системах эта ориентация меняется за счет конформационных изменений и стабилизируется гидрофобными взаимодействиями. Последние процессы не учтены в настоящей модели, их учет является предметом дальнейших исследований.

Модель дискретна по времени и пространству. Для описания процесса движения применялись уравнения броуновской динамики. Основным отличием нашей модели от других моделей броуновской динамики является ее многочастичность. В основе теории броуновской динамики лежат труды Эйнштейна, Смолуховского, Фоккера, Планка и Ланжевена. При расчете столкновений белков использовалось описание формы белков с помощью набора сфер. В нашей модели в явном виде рассматривается броуновское движение, электростатические взаимодействия, столкновения и образование предварительного комплекса белков.

Модель взаимодействия Pc и PSI описывает влияние мутаций Pc на константу связывания его с PSI. Показано, что при определенных значениях параметров, модели могут описывать нелинейную зависимость константы связывания белков от ионной силы. Таким образом, для формирования такого вида зависимости достаточно учета только электростатических взаимодействий.