

Исследование влияния конформационных изменений в структуре цитохрома c_1 на его связывание с цитохромом c

Научный руководитель – Коваленко Илья Борисович

Васюченко Екатерина Павловна

Студент (магистр)

Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, Биологический факультет, Кафедра биофизики, Москва, Россия

E-mail: Vasyuchenko.katya@gmail.com

Цитохром c_1 входит в состав третьего комплекса дыхательной цепи митохондрий и непосредственно взаимодействует с цитохромом c для передачи ему электрона. На данный момент в базе данных PDB (Protein Data Bank) существуют несколько структур цитохромного bc_1 комплекса с различной конформацией цитохрома c_1 . Различия в этих структурах являются ключевыми в процессе связывания цитохрома c_1 с цитохромом c . 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 α -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 распятия α -спирали в участке V168-G185, а также структуру, соответствующую минимуму энергии. Работа выполнена с использованием оборудования Центра коллективного пользования сверхвысокопроизводительными вычислительными ресурсами МГУ имени М.В. Ломоносова. Работа поддержана грантом РФФИ № 18-07-01219.

Источники и 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.