

Молекулярно-динамическое моделирование взаимодействия фотосистемы 1 с низкомолекулярными акцепторами электрона**Научный руководитель – Милановский Георгий Евгеньевич*****Кушнарёва Дарья Кирилловна****Студент (специалист)*

Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, Факультет биоинженерии и биоинформатики, Москва, Россия

E-mail: kushnareva.daria@gmail.com

Фотосистема 1 (ФС1) — ключевой пигмент-белковый комплекс цепи переноса электронов в тилакоидных мембранах цианобактерий и хлоропластов. В состав комплекса входят кофакторы различного строения: хлорофиллы, филлохиноны и железо-серные кластеры [Fe₄S₄], обеспечивающие эффективный перенос электрона. В естественной среде донором и акцептором электронов для ФС1 могут выступать белки пластоцианин и ферредоксин, соответственно, а *in vitro* перенос электрона с участием ФС1 исследуют через взаимодействие с различными низкомолекулярными редокс-медиаторами. В прошлом году при изучении сайтов связывания молекулярного кислорода на акцепторной стороне ФС1 были обнаружены неравновесные процессы в используемой молекулярно-динамической (МД) модели, в связи с чем возникла необходимость её оптимизации.

Целью данной работы являлось создание стабильной МД модели мономера ФС1 цианобактерий в липидном бислое, включающей все основные кофакторы цепи переноса электрона. За основу была взята кристаллографическая структура тримерной ФС1 из цианобактерии *Synechocystis sp.* PCC 6803 (pdb:5ou0). Для моделирования был выделен мономер 1, включая белковые цепи, кофакторы реакционного центра и антенны и связанная вода.

Моделирование проводилось с помощью пакета Gromacs 2025.2 с использованием силового поля Amber03. Плохо разрешенные фрагменты исходной структуры были достроены по гомологии с другими мономерами в тримере. Особое внимание было уделено определению состояния протонированности аминокислотных остатков с помощью программы PROPKA3 [1] и сервера H++ 3.0 [2] с учетом локальной диэлектрической проницаемости для различных частей пигмент-белкового комплекса [3]. Протонирование и ориентация боковых цепей остатков гистидина были скорректированы вручную с учётом корректного формирования водородных связей.

Подготовленная структура мономера будет помещена в водную ячейку с последующей минимизацией энергии и уравниванием. Полученная конформация ФС1 будет встроена в липидный бислой с последующим уравниванием до достижения стабильных значений энергии системы и RMSD.

Полученная модель будет использована для исследования взаимодействия молекулярного кислорода с сайтами вблизи филлохинонов A₁ методом расчета профиля потенциала средней силы (PMF).

Отработанный протокол представляет интерес для создания МД моделей ФС1 из других организмов (зелёных водорослей и высших растений), изучения свойств ФС1 с точечными аминокислотными заменами и модифицированными кофакторами с измененными редокс-свойствами.

Источники и литература

- 1) Olsson MH. et al. PROPKA3: Consistent Treatment of Internal and Surface Residues in Empirical pKa Predictions. // J Chem Theory Comput. 2011 Feb 8;7(2):525-37.
- 2) Gordon JC. et al. H++: a server for estimating pKas and adding missing hydrogens to macromolecules // Nucleic Acids Res. Jul 1 2005. ;33:W368-71.
- 3) Ptushenko V.V. et al. Semi-continuum electrostatic calculations of redox potentials in photosystem I // Photosynth Res 97, 55–74 (2008)