

**Моделирование структуры бокового цилиндра фикобилисомы *Synechocystis* sp. PCC 6803**

**Научный руководитель – Зленко Дмитрий Владимирович**

***Иванова Анастасия Владимировна***

*Студент (бакалавр)*

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

*E-mail: ivanova.anastasia.2014@post.bio.msu.ru*

Фикобилисомы (ФБС), антенные комплексы, используемые цианобактериями для сбора энергии света [1]. Благодаря ФБС цианобактерии могут использовать свет из средней части видимого спектра, недоступную обычным фотосинтетикам.

ФБС состоит из белков фикобилипротеинов (ФБП), связывающих пигменты и линкерных белков. ФБП можно разделить по спектру поглощения и локализации в ФБС на фикоэритрины (ФЭ), фикоцианины (ФЦ) и аллофикоцианины (АФЦ). ФБП образуют полые дисковые структуры (тримеры), соединяющиеся попарно в гексамеры, которые собираются в цилиндры. Линкерные белки находятся в полости гексамеров, связывают их и участвуют в тонкой подстройке их спектральных свойств.

Объект моей работы, ФБС *Synechocystis* sp. PCC 6803, состоит из ядра (АФЦ), расположенного на мембране тилакоидов и отходящих от него шести боковых цилиндров, состоящих из трех гексамеров ФЦ каждый.

С<sub>3</sub> симметрия гексамеров, мешающая использованию экспериментальных усредняющих методов, и «мягкость» структуры ФБС, ограничивающая возможность получения кристаллов, осложняют исследования молекулярной структуры комплекса. Метод молекулярного моделирования позволяет анализировать индивидуальные молекулы и лишен таких ограничений.

Работа посвящена исследованию структуры бокового цилиндра. Линкеры содержат два вида глобулярных доменов: Pham\_00427 и Pham\_01383. Структура 427 домена из линкеров СрсС1 и СрсС2 была разрешена методом РСА (3NPH и 3PRU). Для белка СрсG она была смоделирована по гомологии (MODELLER, шаблоны: 2I8V, 3NPH и 3PRU). Структура 1383 для СрсС1, СрсС2 и СрсD была смоделирована по гомологии на основании кристалла АФЦ в комплексе с 1383 (1B33 из *M. Laminosus*). Также на основании 1B33 было установлено расположение этого домена в полости гексамера. Расположение Pham\_00427 смоделировали методом молекулярного докинга: сначала Rigid-Body Docking (HEX), затем с учетом подвижности поверхностных групп белков (AutoDock). Неструктурированные петли между доменами, будут уложены методом молекулярной динамики при температуре 1000К в течение микросекунды, движение же остальных атомов системы будет ограничено. Это позволяет найти все возможные состояния, затем с помощью матриц взаимных расстояний между аминокислотами кластеризовать конформации и рассчитать свободные энергии кластеров используя потенциал средней силы. Затем ограничения подвижности будут сняты, в систему будет добавлена вода, что позволит получить финальную структуру.

**Источники и литература**

- 1) H. Liu et al. Phycobilisomes Supply Excitations to Both Photosystems in a Megacomplex in Cyanobacteria // Science vol. 386, no. 2002, pp. 376–386, 2010.