

МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ФЕРРЕДОКСИНА И ФЕРРЕДОКСИН-НАДФ⁺-РЕДУКТАЗЫ ИЗ РАЗНЫХ ФОТОСИНТЕЗИРУЮЩИХ ОРГАНИЗМОВ

Дьяконова А.Н., Федоров В.А., Хрущев С.С., Коваленко И.Б., Ризниченко Г.Ю.

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Биологический факультет, кафедра биофизики, Россия, 119234, Москва, Ленинские горы 1, корп. 24, 7(495)9390289, alex.diakonova@gmail.com

Взаимодействие ферредоксина (Фд) и ферредоксин-НАДФ⁺-редуктазы (ФНР) является конечным этапом электрон-транспортной цепи фотосинтеза. Используя полученные от Фд электроны, ФНР восстанавливает НАДФ⁺ для цикла фиксации углерода. В корневых пластидах ФНР, наоборот, восстанавливает ферредоксин, который затем передает электроны в пути фиксации азота и серы.

Ранее было показано, что электростатические взаимодействия играют основную роль в образовании комплекса Фд-ФНР [1]. Исходя из геометрии и электростатических свойств молекул, мы исследовали методами броуновской динамики и кластерного анализа (пакеты ProKSim и GROMACS) [2] специфичность взаимодействия Фд и ФНР из разных фотосинтезирующих организмов и разных органов высших растений. Для анализа мы использовали доступные структуры из Protein Data Bank: ФНР из корня (ID: 5H59) и листа (1GAQ) *Zea mays*, и ФНР из *Nostoc sp.* в комплексе с НАДФ⁺ (1GJR) и без НАДФ⁺ (1EWY и 1GJR); Фд из листа *Zea mays* (1GAQ), Фд-1 и Фд-2 из *Chlamydomonas reinhardtii* (2MH7 и 4ITK, соответственно) и Фд из *Nostoc sp.* (1EWY).

Моделирование показало, что ФНР из корня *Zea mays* взаимодействует со всеми исследованными Фд с одинаково высоким сродством (константа скорости образования комплекса $k \sim 2,42\text{--}4,8 \times 10^9 \text{ M}^{-1}\text{s}^{-1}$). Ферредоксин из *Nostoc sp.* также эффективно взаимодействует с разными ФНР ($k \sim 1,5\text{--}4,8 \times 10^9 \text{ M}^{-1}\text{s}^{-1}$). Наличие или отсутствие связанного с ФНР НАДФ⁺ не влияет на скорость взаимодействия с Фд. Фд из *C. reinhardtii* обладают наибольшей специфичностью, что, по-видимому, объясняется наличием в *C. reinhardtii* шести Фд с различными функциями.

Работа выполнена с использованием оборудования Центра коллективного пользования сверхвысокопроизводительными вычислительными ресурсами МГУ имени М.В. Ломоносова. Работа поддержана грантом РФФИ № 17-04-00676.

Литература

1. Hurley J.K., Hazzard J.T., Martinez-Julvez M., Medina M., Gomez-Moreno C., Tollin G. Electrostatic forces involved in orienting *Anabaena* ferredoxin during binding to *Anabaena* ferredoxin:NADP⁺ reductase: Site-specific mutagenesis, transient kinetic measurements, and electrostatic surface potentials // *Protein Science* **V. 8**, 1999. Pp. 1614–1622.
2. Khruschev S.S., Abaturova A.M., Fedorov V.A., Kovalenko I.B., Riznichenko G.Yu., Rubin A.B. The identification of intermediate states of the electron-transfer proteins plastocyanin and cytochrome f diffusional encounters // *Biophysics*. **Vol. 60**, No. 4, 2016. Pp. 513–521.