

ИДЕНТИФИКАЦИЯ МУТАЦИЙ ФЕРРЕДОКСИНА, ПОТЕНЦИАЛЬНО УВЕЛИЧИВАЮЩИХ ВЫХОД ВОДОРОДА У ФОТОСИНТЕЗИРУЮЩИХ ОРГАНИЗМОВ

Дьяконова А.Н., Хрущев С.С., Федоров В.А., 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

Ферредоксин (Фд) служит конечным акцептором электрон-транспортной цепи фотосинтеза. Он передает электроны на ферредоксин-НАДФ⁺-редуктазу (ФНР), которая восстанавливает НАДФ⁺ для цикла Кребса, и на другие белки, участвующие в метаболизме серы и азота. Помимо этого, в некоторых организмах ферредоксин передает электроны на гидрогеназу – белок, восстанавливающий протоны с образованием молекулярного водорода. Мы исследовали точечные мутации ферредоксина, потенциально способные улучшить его взаимодействие с гидрогеназой и ухудшить его взаимодействие с ФНР.

Было проведено броуновское многочастичное моделирование [1] движения пар белков (Фд–фотосистема I, Фд–ФНР и Фд–гидрогеназа) в виртуальном реакционном объеме из случайного положения до достижения такого взаимного расположения белков, в котором энергия электростатического притяжения между партнерами была не менее 8кТ. Для моделирования использовались структуры из Protein Data Bank: ферредоксин *Chlamydomonas reinhardtii* 2MH7, ферредоксин цианобактерии *Synechocystis* sp. 10FF, ФНР из листа *Zea mays* 1GAQ, ФНР из корня *Zea mays* 5H59. Были определены константы скорости образования энергетически выгодных состояний с энергией электростатического притяжения между партнерами больше 8кТ и средние расстояния между реакционными центрами в них.

Для цианобактериального ферредоксина скорость образования энергетически выгодных конфигураций с энергией притяжения 8кТ выше, чем для ферредоксина *Chlamydomonas*, однако при этом среднее расстояние между реакционными центрами у него в этом состоянии больше. Это объясняется существенно большим суммарным зарядом цианобактериального ферредоксина, что позволяет ему достичь этой энергии на большем удалении. В результате, задачи получения мутантов, увеличивающих выход водорода, в случае цианобактерий и зеленых водорослей разные: если в первом случае достаточно ослабить связывание с ФНР, то во втором требуется заодно усилить связывание с гидрогеназой, с которой ферредоксин *Chlamydomonas* взаимодействует относительно слабо.

Литература.

1. Khruschev S. S., Abaturova A. M., Fedorov V. A., Ustinin D.M., Kovalenko I. B., Riznichenko G. Yu., and Rubin A. B. Brownian-dynamics simulations of protein-protein interactions in the photosynthetic electron transport chain //Biophysics Vol. 60, No. 2, 2015. Pp. 212–231.