

## МНОГОЧАСТИЧНОЕ БРОУНОВСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ФЕРРЕДОКСИНА, ФНР И ГИДРОГЕНАЗЫ CHLAMYDOMONAS REINHARDTII

Дьяконова А.Н., Хрущев С.С., Ризниченко Г.Ю.

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова,  
Биологический ф-т, каф. Биофизики,  
Россия, 119992, Москва, Ленинские горы, МГУ,  
Тел. (495)9390289, e-mail: alex.diakonova@gmail.com

Производство биоводорода является важной биотехнологической задачей. Некоторые организмы, включая зеленые водоросли, содержат фермент гидрогеназу, способный восстанавливать протоны до молекулярного водорода. Гидрогеназа получает электроны от белка ферредоксина – конечного акцептора электрон-транспортной цепи фотосинтеза. Помимо гидрогеназы ферредоксин также взаимодействует с другими белками, в первую очередь с ферредоксин-НАДФ<sup>+</sup>-редуктазой, восстанавливающей НАДФ<sup>+</sup> для цикла Кальвина. Нашей задачей было изучение процесса переключения электронного потока ферредоксина между ФНР и гидрогеназой в зависимости от условий среды.

Мы использовали метод прямого многочастичного моделирования. В данном методе отдельные молекулы движутся за счет воздействия броуновской силы и электростатических сил, создаваемых соседними молекулами и растворителем. Мы создали три модели взаимодействия белков: парные модели образования комплексов Фд-ФНР и Фд-гидрогеназа и тройную модель конкуренции ФНР и гидрогеназы за ферредоксин.

Из эксперимента известно, что рН стромы хлоропластов в темноте составляет около 6, а на свету увеличивается до 8-8,5, и потенциально данный процесс может влиять на взаимодействие белков друг с другом. На модели мы показали, что константа скорости взаимодействия ферредоксина и ФНР постоянна в широком диапазоне рН. Таким образом, мы предполагаем, что активность ФНР не регулируется изменением рН в строме. С другой стороны, константа скорости образования комплекса Фд-гидрогеназа значительно зависит от рН: в границах 7-9 единиц рН она возрастает в три раза. Казалось бы, поскольку гидрогеназа восстанавливает протоны, ее активность должна быть выше при кислом рН. По-видимому, регуляция сродства гидрогеназы к ее реакционным партнерам (Н<sup>+</sup> и Фд) осуществляется посредством изменения электростатических свойств белков. В темноте гидрогеназа неактивна, а на свету она активируется и взаимодействует с Фд и Н<sup>+</sup>. Таким образом, в хлоропластах рН регулирует скорость производства водорода через изменение сродства гидрогеназы и ферредоксина.