

МНОГОЧАСТИЧНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ БЕЛКОВ ФЕРРЕДОКСИНА И ГИДРОГЕНАЗЫ

Дьяконова А.Н., Коваленко И.Б., Ризниченко Г.Ю.

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

В электрон-транспортной цепи фотосинтеза белок ферредоксин (Фд) служит конечным акцептором электрона с фотосистемы I. Восстановленный Фд может передавать электрон на несколько белков: при линейном электронном транспорте он восстанавливает ферредоксин-НАДФ⁺-редуктазу (ФНР), при циклическом – цитохром b₆f-комплекс. Более того, электроны Фд могут использоваться в метаболических реакциях фиксации серы и азота. В некоторых организмах в определенных условиях Фд передает электроны на гидрогеназу – белок, способный восстанавливать протоны до молекулярного водорода, экологически чистого источника энергии. Этот процесс строго регулируется, и в зеленых водорослях *Chlamydomonas sp.* протекает только в анаэробных условиях при голодании по сере. Целью нашей работы является создание модели взаимодействия Фд и гидрогеназы, учитывающей геометрию и электростатические свойства белков [1]. На модели исследуется зависимость константы скорости связывания белков от свойств среды: ионной силы и рН. Поскольку основным конкурентом гидрогеназы за ферредоксин является ФНР, мы также провели сравнение результатов модели с построенной ранее моделью взаимодействия ферредоксина и ФНР [2].

Работа поддержана грантами РФФИ 11-04-01019-а и 11-04-01268-а.

Литература

1. *Riznichenko G.Yu., Kovalenko I.B., Abaturova A.M., Diakonova A.N., Ustinin D.M., Grachev E.A., Rubin A.B.* New direct dynamic models of protein interactions coupled to photosynthetic electron transport reactions // *Biophysical Reviews*, v. 2, № 3, 2001. Pp. 101-110.
2. *Kovalenko I.B., Diakonova A.N., Abaturova A.M., Riznichenko G.Yu., Rubin A.B.* Direct computer simulation of ferredoxin and FNR complex formation in solution // *Physical Biology*, v.7, №3, 026001