

## МОДЕЛИРОВАНИЕ ЗАВИСИМОСТИ СКОРОСТИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ФЕРРЕДОКСИНА С ФНР И ГИДРОГЕНАЗОЙ ОТ pH И ИОННОЙ СИЛЫ

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

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

Небольшой растворимый белок ферредоксин в строме хлоропластов принимает электрон от фотосистемы I и передает его в несколько путей метаболизма, в первую очередь, в путь фиксации углерода. Он осуществляет это через белок ферредоксин:НАДФ<sup>+</sup>-редуктазу (ФНР), которая за счет электронов ферредоксина восстанавливает НАДФ<sup>+</sup> до НАДФН, необходимого для функционирования цикла Кальвина. Одним из альтернативных путей является передача электронов с ферредоксина на белок гидрогеназу, восстанавливающую протоны до молекулярного водорода. Это побочный путь метаболизма, работающий в строго определенных условиях, однако, он имеет важное значение для биотехнологии в качестве способа получения биотоплива.

Методом прямого многочастичного моделирования [1] мы исследовали влияние свойств среды, а именно pH и ионной силы раствора, на скорость взаимодействия ферредоксина и ФНР. В модели молекулы белков диффундируют в растворе за счет броуновской и электростатической сил. С заданной вероятностью белки образуют комплексы при сближении на расстояние, определяемое их структурой.

Зависимость от ионной силы для скорости реакции ферредоксина с ФНР имеет максимум при  $I = 50$  мМ. Это указывает на то, что при низких  $I$  электростатические взаимодействия между белками настолько велики, что образуются непродуктивные комплексы, в которых молекулы неправильно ориентированы относительно друг друга. Скорость образования комплекса ферредоксина и гидрогеназы монотонно снижается при увеличении ионной силы.

Мы показали, что для широкого диапазона pH (от 5 до 9) скорость реакции ферредоксина с ФНР практически не изменяется, когда как зависимость для ферредоксина и гидрогеназы имеет ярко выраженный максимум. Это указывает на разные механизмы регуляции активности белков.

Работа поддержана грантами РФФИ 12-07-33036-мол\_а\_вед и 11-04-01019-а и ФЦП 8077. Вычисления производились на суперкомпьютерах Московского университета «Чебышев» и «Ломоносов».

### 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, 2011. 101-110.