Секция «Биоинженерия и биоинформатика»

Молекулярно-динамическая модель переноса электрона в фотосистеме 1 цианобактерий

Милановский Георгий Евгеньевич

Аспирант

Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова, Факультет биоинженерии и биоинформатики, Москва, Россия

E-mail: milanovsky@gmail.com

Кофакторы реакционных центров фотосистем (ФС) 1 и 2, необходимые для переноса электрона, гомологичны друг другу, однако их среднеточечные редокс-потенциалы отличаются более чем на 700 мВ. Разница в их свойствах предположительно обусловлена белковым окружением, однако детали этой зависимости до сих пор неясны. Было показано, что у мутантных штаммов цианобактерии *Synechocystis sp.* PCC 6803 с точечными заменами в ФС1 метионинов M688$_{PsaA}$ и M688$_{Psa\mathrm{B}}$ на аспарагины (M688N$_{PsaA}$ и M668N$_{PsaB}$) перенос электронов идет преимущественно по ветви A двух симметричных ветвей редокс-кофакторов [1], при этом скорость первичных стадий переноса электрона существенно замедляется по сравнению с диким типом. Также было показано, что перенос электронов от димера хлорофилла P_{700} к первичному акцептору хлорофиллу A_0 в ФС1 в той же цианобактерии происходит за время <100 фс, в 10-100 раз быстрее, чем предполагалось ранее [2].

Для выяснения возможных механизмов сверхбыстрого первичного разделения зарядов, выявления асимметрии этого процесса и влияния на него мутаций в ближайшем окружении A_0, на основании трехмерной структуры ФС1 *Synechococcus elongatus* впервые была построена полная молекулярно-динамическая модель ФС1, на которой моделировались процессы образования первичной и вторичной ион-радикальных пар (для ФС1 дикого типа и мутантов M688N$_{PsaA}$ и M668N$_{PsaB}$). Было показано, что мутация в любой из цепей повышает энергию реорганизации системы λ при вторичном разделении зарядов более чем на 120 мВ по сравнению с диким типом. Подобное изменение λ приводит к повышению энергии активации данной реакции и может объяснить ее замедление, наблюдаемое экспериментально. Оценка λ была независимо проверена электростатическими методами.

Были построены осцилляционные спектры ФС1 в различных состояниях заряжения кофакторов, которые согласуются со спектрами, наблюдаемыми при сверхбыстрой спектроскопии и могут быть использованы для построения количественной модели переноса электрона в ФС1.

Литература

1. Savitsky A, Gopta O, Mamedov M, Golbeck JH, Tikhonov A, Möbius K, Semenov A. Alteration of the axial Met ligand to electron acceptor A0 in photosystem I: effect on the generation of P700+A1– radical pairs as studied by W-band transient EPR // Appl Magn Reson, 2010, 37, 85-102

2. Shelaev I, Gostev F, Mamedov M, Sarkisov O, Nadtochenko V, Shuvalov V, Semenov A. Femtosecond primary charge separation in Synechocystis sp. PCC 6803 photosystem I // Biochim. Biophys. Acta, 2010, 1797, 1410-20