

Сайты взаимодействия молекулярного кислорода с филлохинонами A1a и A1b в фотосистеме 1

Научный руководитель – Милановский Георгий Евгеньевич

Кушнарёва Дарья Кирилловна

Студент (специалист)

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

E-mail: kushnareva.daria@gmail.com

Фотосистема 1 (ФС1) - это пигмент-белковый комплекс цепи переноса электронов в тилакоидных мембранах цианобактерий и хлоропластов. Энергия квантов солнечного света используется в ФС1 для передачи электрона от первичного донора (специальной пары хлорофиллов P₇₀₀) к цепочке акцепторов (хлорофиллов, хинонов и железо-серных кластеров), в конечном итоге восстанавливая NADP⁺ до NADPH. Возможным побочным эффектом функционирования ФС1 является реакция Мелера - окисление кислорода (O₂) до супероксид-анион-радикала - когда акцептором электронов в условиях избыточного освещения становится растворенный в окружающей среде молекулярный кислород. Ранее было показано, что перенос электрона на кислород может происходить не только с терминальных железо-серных кластеров [F_A/F_B], но и со вторичных акцепторов электрона - высокопотенциальных филлохинонов A_{1a} и A_{1b} [1,2].

Для оценки вероятности данных реакций в рамках курсовой работы были изучены возможные сайты связывания молекулярного кислорода вблизи сайтов A₁ из ФС1 разных организмов.

Были сопоставлены структуры ФС1 из цианобактерий (модельного организма *Synechococcus* sp и адаптированной к условиям повышенного освещения *Acaryochloris marina*), зелёных водорослей (*Dunaliella salina*, *Chlamydomonas reinhardtii*) и высших растений. Во всех изученных структурах в непосредственной близости (7-9 Å) к филлохинонам A₁ были обнаружены водные карманы, сообщающиеся с внешней средой, потенциально способные выступить в качестве сайтов связывания молекулярного кислорода.

Для характеристики обнаруженных гипотетических сайтов связывания использовалась молекулярно-динамическая модель ФС1 цианобактерий. Количественная оценка энергии связывания молекулярного кислорода в найденном сайте, полученная методом расчета профиля потенциала средней силы (umbrella sampling), составила более 20 кДж.

Источники и литература

- 1) Kozuleva MA, Petrova AA, Mamedov MD et al (2014) O₂ reduction by photosystem I involves phyloquinone under steadystate illumination. FEBS Lett 588:4364–4368. doi:10.1016/j.febslet.2014.10.003
- 2) Milanovsky, G.E. et al (2017) Kinetic modeling of electron transfer reactions in photosystem I complexes of various structures with substituted quinone acceptors. Photosynth Res 133, 185–199, doi:10.1007/s11120-017-0366-y