

Заключение комиссии
по диссертации Дьяконовой Александры Никитичны
на тему «Молекулярные механизмы переключения электронных потоков от ферредоксина на ФНР и гидрогеназу. Прямое многочастичное моделирование» на соискание ученой степени кандидата биологических наук по специальности 03.01.02 – «биофизика»

Комиссия диссертационного совета Д 501.001.96 в составе д.б.н., проф. Кренделевой Т.Е., д.б.н., проф. Погосяна С.И., д.б.н., проф. Максимова Г.В. рассмотрела текст диссертации, основные публикации и проект автореферата.

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования «Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова», научный руководитель д.ф.-м.н., проф. Ризниченко Г.Ю.

Диссертационная работа Дьяконовой А.Н. посвящена исследованию молекулярных механизмов переключения потоков электронов с ферредоксина на ФНР и гидрогеназу методом многочастичной броуновской динамики.

В рамках диссертационной работы были разработаны прямые многочастичные модели взаимодействия ферредоксина и ФНР, ферредоксина и гидрогеназы и конкурентная модель взаимодействия трех белков в растворе. Были исследованы форма и свойства электростатических полей молекул ферредоксина, ФНР и гидрогеназы. На модели было показано, что изменение рН и ионной силы значительно влияют на сродство ферредоксина к ФНР и гидрогеназе. Была получена зависимость константы скорости взаимодействия ферредоксина с ФНР от ионной силы, имеющая немонотонный характер. Данный результат подтвердил гипотезу о том, что при низкой ионной силе электростатические взаимодействия приводят к агрегации белков в «непродуктивные» комплексы. Было показано, что скорость образования комплексов Фд-ФНР и Фд-гидрогеназа определяется электростатическими взаимодействиями белков.

На модели была изучена зависимость скорости взаимодействия ферредоксина с ФНР и гидрогеназой. Было показано, что константа скорости связывания ферредоксина с гидрогеназой при увеличении рН от 7 до 9 возрастает в три раза, когда как в широком диапазоне рН, от 5 до 9, константа скорости связывания ферредоксина и ФНР практически не изменяется. Казалось бы, поскольку гидрогеназа восстанавливает протоны, она должна быть более активна при низком рН, однако это не так, что подтверждается экспериментальными данными. Можно предположить, что сродство гидрогеназы к ее реакционным партнерам – протонам и ферредоксину – регулируется независимо, то есть в хлоропласте скорость выделения водорода регулируется рН за счет регуляции сродства гидрогеназы к ферредоксину, а не напрямую за счет изменения количества протонов.

С использованием модели ферредоксина и гидрогеназы были предсказаны мутации заряженных аминокислотных остатков, увеличивающие скорость взаимодействия данных белков.

Диссертация соответствует профилю совета. Основные материалы диссертации опубликованы. Всего автором опубликовано 20 работ, из них в рецензируемых российских и иностранных журналах, входящих в перечень ВАК – 7; тезисов докладов на научных конференциях – 13.

Диссертационная работа Дьяконовой А.Н. посвящена актуальной научной проблеме, имеет высокую теоретическую и практическую ценность и соответствует требованиям ВАК, предъявляемым к кандидатским диссертациям.

Комиссия считает, что диссертация может быть представлена к защите на совете по биофизике (специальность - 03.01.02).

В качестве официальных оппонентов рекомендуются:

Иванов Борис Николаевич, доктор биологических наук, заведующий лабораторией фотосинтетического электронного транспорта в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки «Институт фундаментальных проблем биологии Российской академии наук», г. Пушкино,

Чугунов Антон Олегович, кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник Федерального государственного бюджетного учреждения науки "Институт биоорганической химии им. академиков М.М. Шемякина и Ю.А. Овчинникова Российской академии наук", г. Москва.

На официальный отзыв диссертацию направить в Федеральное государственное бюджетное учреждение науки "Институт математических проблем биологии Российской академии наук", г. Пушкино.

Члены комиссии:

Д.б.н., проф. Кренделева Т.Е.,

Д.б.н., проф. Погосян С.И.,

Д.б.н., проф. Максимов Г.В.

29.06.2016