



绿色植物光系统I及其光合作用调控的结构基础*

苏小东^{1,2)} 李梅^{1)**}⁽¹⁾ 中国科学院生物物理研究所生物大分子重点实验室, 北京 100101; ⁽²⁾ 中国科学院大学生命科学学院, 北京 100049

摘要 光系统I被认为是自然界中最高效的纳米光化学机器, 其复杂的结构和精细的调控机制确保了光合作用的高效进行。绿色植物光系统I由核心复合物和多样的外周捕光天线构成, 并参与包括状态转换、环式电子传递等多种光合作用调节过程。本文主要以笔者所在实验室在绿色植物光系统I及其参与光合作用调控的结构生物学方面取得的进展进行综述, 使人们对这一领域有更深入的理解。

关键词 光系统I, 蛋白质结构, 光合作用调控, 状态转换, 环式电子传递

中图分类号 Q71, Q615

DOI: 10.16476/j.pibb.2024.0270

绿色植物包括绿藻和陆地植物等, 通过光合作用为地球的生物圈提供了氧气和食物等资源, 对维持地球的大气环境和生态平衡起到重要作用。绿色植物的光合反应过程按照对光的需求, 分为依赖光的光反应和不需要光的卡尔文循环(也称暗反应)两个阶段, 光反应主要是由位于叶绿体类囊体膜上的多种蛋白质复合物共同催化完成的(图1), 其中光系统I(photosystem I, PSI)和光系统II(photosystem II, PSII)都是结合大量色素的多亚基膜蛋白复合物, 在光能吸收、激发能传递和转换以及电子传递过程中都发挥着重要作用^[1]。

PSI被认为是自然界中能量转化效率最高的纳米光化学机器之一^[2], 绿色植物PSI可以接受类囊体腔侧的质体蓝素(plastocyanin, Pc)传来的电子, 并将电子传递到位于叶绿体基质侧的铁氧还蛋白(ferredoxin, Fd)(图1), 用于烟酰胺腺嘌呤二核苷酸磷酸(NADP⁺)的还原^[3], 因此PSI也被称为光驱动的Pc:Fd氧化还原酶^[4]。PSI核心复合物由12~15个蛋白质亚基组成, 在不同光合生物中较为保守, 光驱动的电荷分离和电子传递等过程发生在核心复合物; 而外周天线主要负责捕获光能并将之传递到核心。绿色植物PSI的捕光天线主要由具有3段跨膜螺旋的捕光复合物I(light harvesting complex I, LHCI)组成, 并与PSI核心组装形成PSI-LHCI超复合物。不同绿色植物的LHCI蛋白在

组成、数量、排布、与核心的相互作用等方面表现出较大差异^[5], 这些差异也是绿色植物对生长环境长期适应的结果, 有助于植物的高效光合和优化生长。

由于自然环境是多变的, 为了抵御各种逆境条件, 光合生物进化出复杂且精细的调控机制, PSI在很多调控过程中也扮演着重要角色。光照条件是影响光系统复合物最重要的因素, 包括光强和光质条件等, 不同物种的PSI可以通过结合不同数量的捕光天线来适应生存环境中不同强度的光照条件^[5-6], 而不同的光质条件可以优先激发不同的光系统, PSI参与的状态转换调节可以平衡激发能在两个光系统间的分配, 是植物和绿藻等适应光环境变化的一种重要调节机制^[7]。此外, 围绕PSI的环式电子传递产生跨膜质子动力势, 用于驱动三磷酸腺苷(ATP)的合成, 但该过程不产生还原型烟酰胺腺嘌呤二核苷酸磷酸(NADPH), 因而环式电子传递增加光反应产物ATP/NADPH比例, 有助于提高卡尔文循环效率^[8], 也是光合生物应对逆境胁迫条件的一种重要调节机制。

* 国家自然科学基金(31930064, 32171183, 32371247), 中国科学院青年创新促进会(Y2022038)和中国科学院稳定支持基础研究领域青年团队计划(YSBR-015)资助项目。

** 通讯联系人。

Tel: 010-64888511, E-mail: meili@ibp.ac.cn

收稿日期: 2024-06-26, 接受日期: 2024-08-21

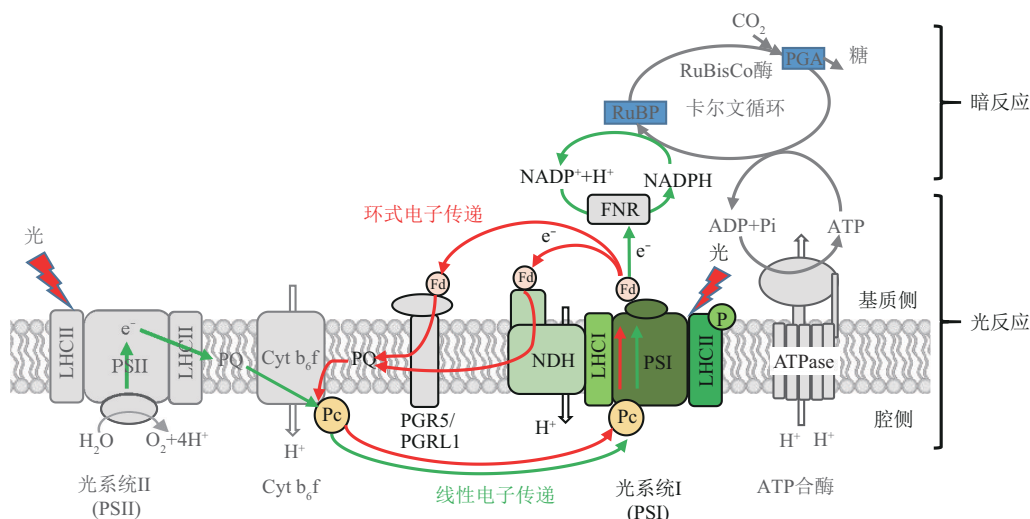


Fig. 1 Scheme of the photosynthesis reactions

图1 光合作用反应过程示意图

正是由于PSI及其调控相关蛋白质复合物发挥的重要作用,确保了光合作用的高效进行和精细调控。因而了解这些蛋白质和复合物的结构对于理解光合作用的高效性和适应性至关重要,也吸引了国内外众多的科学家在这一领域开展了前赴后继的研究。目前已经有多个物种的PSI及其参与光合作用调控的相关复合物结构被解析^[9-15],为理解PSI高效的能量收集、激发能传递及光合作用调控机制提供了大量的数据。笔者所在实验室在光合作用结构生物学领域做出了一定贡献,本文主要针对本实验室在绿色植物PSI及相关复合物结构方面取得的研究进展进行综述,使人们对PSI及其参与的光合作用调控能够有更加深入、直观的认识。

1 被子植物PSI-LHCI

PSI是一种多亚基超大色素蛋白质复合物,绿色植物PSI核心主要以单体形式存在,其结构研究早期主要集中在被子植物,尤其是豌豆(*Pisum sativum*, *Ps*) PSI-LHCI复合物。早在20多年前,以色列科学家就解析了*Ps*PSI-LHCI复合物分辨率为4.4 Å的晶体结构^[10],目前,*Ps*PSI-LHCI结构的最高分辨率已经推进到2.4 Å^[16]。被子植物PSI核心复合物由14个蛋白质亚基(PsaA-PsaL、PsaN和PsaO)组成,但很长时间以来,所解析的PSI-LHCI结构中都缺乏PsaN和PsaO两个核心亚基,这两个蛋白质可能与其他核心亚基的结合比较松散,因而在纯化的过程中丢失了。直到2018年,本实验室解析了玉米(*Zea mays*, *Zm*) PSI结合有

PSII外周天线LHCII的*Zm*PSI-LHCI-LHCII复合物的结构^[12],其PSI部分包含PsaN和PsaO,从而首次揭示了植物PSI的完整结构(图2a)。

植物PSI中PsaA和PsaB为两个最大的核心亚基,各自具有11段跨膜螺旋,形成膜二次对称的二聚体,结合了PSI核心中绝大多数叶绿素分子以及与电子传递相关的辅因子。PsaC、PsaD、PsaE和PsaN是膜外亚基(图2b),其中PsaC-PsaE位于类囊体膜基质侧,且PsaC结合2个4Fe-4S簇(F_A 和 F_B),而PsaN位于类囊体腔侧,并结合2个叶绿素分子(图2c)。其他8个核心亚基(PsaF-PsaL、PsaO)均为跨膜蛋白,分布在PsaA-PsaB周围,并均结合有色素。从垂直于膜的方向看,PSI核心整体形成一个扇形,其中PsaL和PsaH位于扇形的顶点,PsaF和PsaJ位于扇形的圆弧侧,PsaK和PsaG位于圆弧的2个端点,而PsaI和PsaO则分别位于扇形的2个侧边(图2a)。被子植物PSI结合4个LHCI蛋白,以Lhca1-Lhca4-Lhca2-Lhca3的顺序形成弧形带,结合在PsaG-PsaF-PsaK亚基一侧,其中a1和a3与核心结合更为紧密,并且具有更高的能量传递效率^[11]。值得注意的是,PsaN和PsaO也参与外周天线蛋白向PSI核心传能,其中PsaN位于Lhca2与PsaA之间,并介导它们之间的能量传递,而PsaO也结合2个叶绿素分子(图2d),可以帮助LHCII向PSI传递能量(见本文第3部分:PSI参与状态转换的结构基础)。

PsaA和PsaB中有6个叶绿素分子和2个叶绿醌(A1)及1个位于基质侧的4Fe-4S簇(F_X),共

同形成2个分支进行电子传递，靠近腔侧界面处为一对特殊的叶绿素（special pair），因为能够吸收波长为700 nm的光，而被称为P700，P700接收周围其他色素传来的能量，激发电子向下游传递，最终经由F_x到达PsaC亚基上的铁硫簇（F_B）^[17]（图2e）。

PSI的捕光天线LHCI有一个独特的特征，即存在一对能级很低的叶绿素，被称为红叶绿素^[18]，

红叶绿素可以吸收更长波长的光，从而提高了PSI的捕光范围。每对红叶绿素都位于捕光天线朝向PSI核心复合物的一侧（图2f），由于其能级较低，使捕光天线上其他色素的激发能可以快速向红叶绿素传递，提高了能量传递效率，但红叶绿素向核心的能量传递则是从低能级向高能级传递，有一个爬坡（up-hill）的现象^[19]，这种现象可能与光保护相关，其具体的分子机制目前还不清楚。

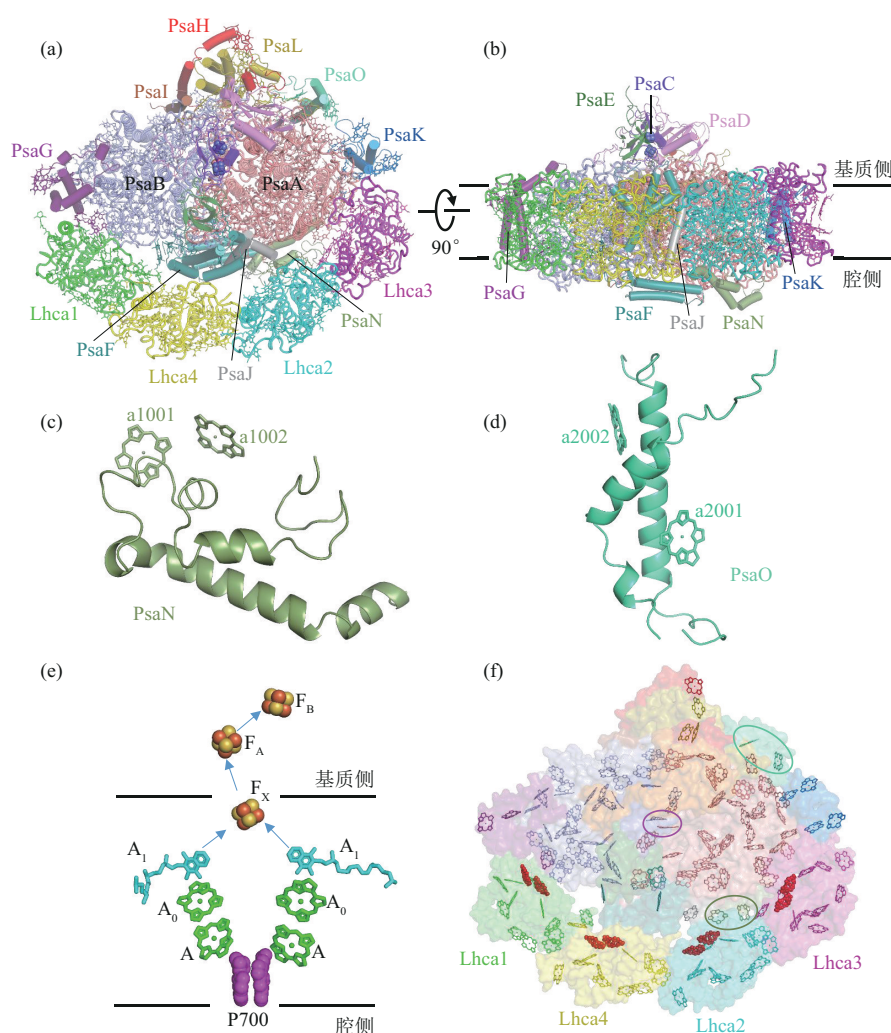


Fig. 2 Structure of PSI-LHCI from *Z. mays*

图2 玉米PSI-LHCI结构

(a, b) *Zm*PSI-LHCI结构 (PDB ID: 5zji)，从基质侧观察 (a) 及沿膜平面观察 (b)。(c) PsaN亚基结构。(d) PsaO亚基结构。(e) PSI中与电子传递相关的辅因子。(f) *Zm*PSI-LHCI中叶绿素排布网络（不同亚基以不同颜色展示：(a) 中PSI核心小亚基用卡通模式显示，PsaA、PsaB和捕光天线用飘带模式显示；(e) 中P700和图中四对红叶绿素用球体模式显示，其余用棒状模式显示；(f) 中P700、PsaN和PsaO结合的叶绿素分别用椭圆框出；为了清晰，(c~f) 中叶绿素删除了叶绿醇链）。

2 绿藻PSI-LHCI

与高等植物相比，绿藻的PSI高分辨率结构研

究相对滞后，早期主要是通过电镜负染色的方法观察其结构，发现作为模式生物的单细胞绿藻——莱茵衣藻（*Chlamydomonas reinhardtii*, Cr）PSI具有

比陆地植物更为复杂的外周天线系统,可能结合多达9个捕光天线蛋白(Lhca1~Lhca9)^[20]。尽管CrPSI具有更大的捕光天线系统,其最外层的捕光天线距离反应中心更远,但时间分辨荧光分析表明CrPSI和高等植物PSI具有相同的平均荧光寿命,表明莱茵衣藻PSI激发能传递效率更高^[21]。

2019年,本实验室解析了CrPSI的结构^[13],发现其有2种主要形式,分别结合8个或10个LHCI天线,命名为PSI-8LHCI和PSI-10LHCI(图3a,b)。除PsaN和PsaO没有在该结构中观察到之外,其他亚基与高等植物PSI核心复合体一致。PSI-8LHCI中8个天线形成平行的2层天线带,每层4个LHCI形成弧形,根据高质量电镜密度,我们对8个捕光天线做了准确区分,从PsaG向PsaK方向看,内层捕光天线依次是Lhca1-Lhca8-Lhca7-Lhca3,外层捕光天线依次是Lhca1-Lhca4-

Lhca6-Lhca5(图3b)。值得注意的是,绿藻Lhca1和Lhca3与被子植物高度相似,也被称为高等植物样LHCI(higher plants-like),Lhca4-Lhca8则是植物同源天线(higher plants orthologous)^[22]。在这8个捕光天线中,每个天线结合14~17个叶绿素,而植物LHCI仅结合14或15个叶绿素。我们的结构表明,由于莱茵衣藻LHCI结合了更多叶绿素,因而能够形成更多的能量传递通路和更为密集的能量传递网络,这可能是其具有更高的能量传递效率的原因之一。

PSI-10LHCI在PsaB侧面额外结合2个捕光天线,但密度表现较差,只能结合文献数据将其初步定为Lhca2和Lhca9,而Lhca2和Lhca9是绿藻特有的捕光天线(green algae specific)^[22]。直到2021年,我们解析了莱茵衣藻状态转换相关复合物CrPSI-LHCI-LHCII的结构^[23],由于有LHCII的存

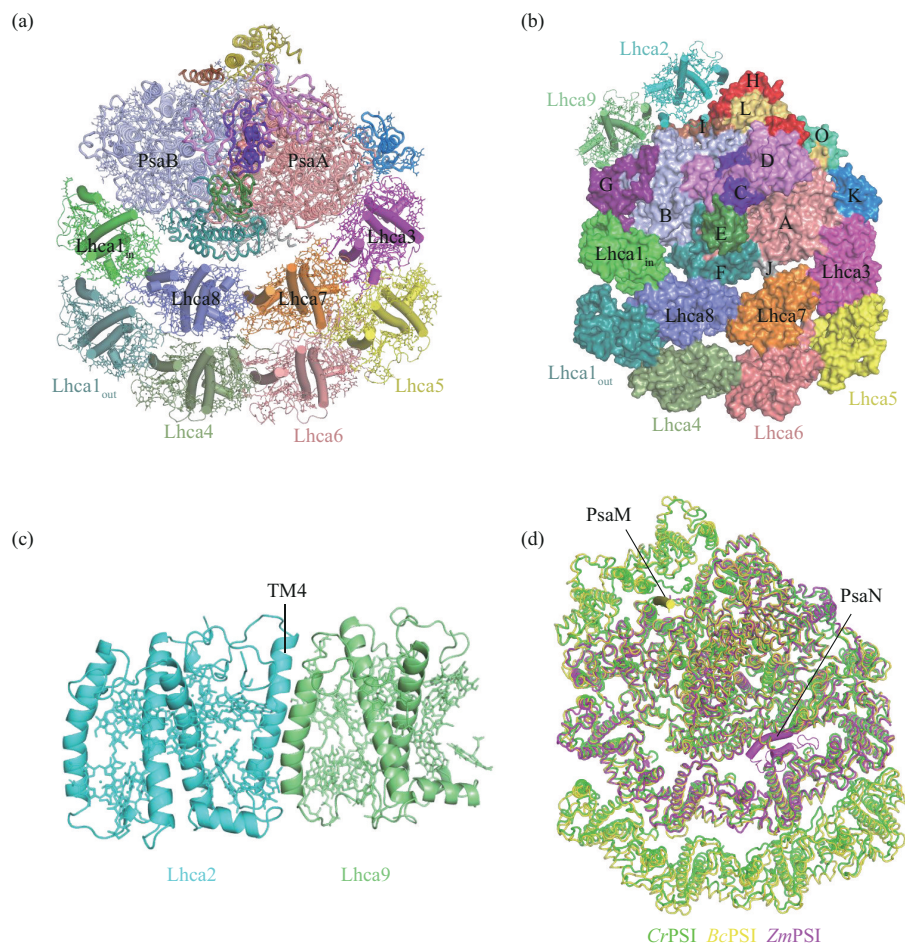


Fig. 3 Structure of PSI-LHCI from *C. reinhardtii*

图3 莱茵衣藻PSI-LHCI结构

(a) CrPSI-8LHCI结构(PDB ID: 6ijj,图中PSI核心亚基用飘带模式显示,捕光天线用卡通模式显示)。(b) CrPSI-10LHCI结构(PDB ID: 7dz7,图中Lhca2和Lhca9用卡通模式显示,其余用表面图显示,核心亚基用单字母标注)。(c) Lhca2与Lhca9形成紧密二聚体。(d) CrPSI与其他物种PSI比较(BcPSI PDB ID: 6igz; ZmPSI PDB ID: 5zji)。(a),(b)和(d)均从基质侧观察,(c)沿膜平面观察。

在,使得 *Cr*PSI 核心与 LHCII 之间的 *PsaO* 以及侧面结合的捕光天线 *Lhca2-a9* 更加稳定,使我们能够构建出 PSI-10LHCI 更加完整的结构(图 3b)。*Lhca9* 与其他 LHCI 类似,具有 3 次跨膜螺旋;而 *Lhca2* 则是一个非常独特的天线蛋白,具有 4 段跨膜螺旋,这种特殊的天线蛋白目前在陆地植物中还没有发现,其第 4 段跨膜螺旋与 *Lhca9* 相互作用,使得 *Lhca2* 与 *Lhca9* 形成紧密的异源二聚体(图 3c)。

与我们的工作同时,来自中国科学院植物研究所的小组解析了另一种绿藻——假根羽藻(*Bryopsis corticulans*, *Bc*) PSI 的结构^[24],该结构与 *Cr*PSI-10LHCI 非常相似,但核心还额外包含 *PsaM* 亚基。*PsaM* 存在于原核蓝藻及部分真核藻类中,但在被子植物中并没有 *PsaM* 的基因^[25]。在 *Bc*PSI 结构中,*PsaM* 亚基位于 PSI 侧面 2 个捕光天线与核心亚基之间(图 3d),并介导了它们之间的相互作用,从而稳定其结合;而莱茵衣藻在进化上缺失了 *PsaM* 亚基,导致侧面的 2 个捕光天线与核心亚基之间结合的更不稳定,侧面 2 个捕光天线与核心之间的灵活结合,可能有助于莱茵衣藻适应不同强度光照条件,从而达到对捕光进行调节的目的。与 *Zm*PSI 相比,莱茵衣藻和假根羽藻 PSI 多出了外层的 4 个和侧面的 2 个捕光天线(图 3d),这与藻类和陆地植物所处的光环境相关,藻类生活在水中,光强较弱,需要更多的外周天线增加捕光,植物上陆后,面临更强的光照,因而减少了外周天线的数量,以适应陆地环境。

3 PSI参与状态转换的结构基础

植物和绿藻在光合作用过程中,会根据光环境的变化进行调节,当 PSI 被优先激发时称为状态 1,当 PSII 被优先激发时称为状态 2。早在 50 多年前日本科学家就发现了光合作用状态转换的现象^[26],这种转换机制是通过 PSII 的主要捕光天线 LHCII 三聚体在 PSII 和 PSI 之间的迁移和可逆结合,从而实现 PSI 和 PSII 之间的激发能平衡分配。状态 2 时,部分 LHCII 被磷酸化,并离开 PSII 结合到 PSI 上,形成 PSI-LHCI-LHCII 复合物,也称状态 2 复合物^[27],对其结构和组装机制的研究是光合作用状态转换领域的热点。早期,对状态转换相关复合物的研究主要是通过电镜负染色的方法,研究表明,

陆地植物中 1 个 PSI 稳定结合 1 个 LHCII^[7, 27],而在绿藻中,1 个 PSI 可以结合多个 LHCII 三聚体^[28]。这种复杂的结构使得植物和绿藻能够在光环境变化时,快速调整光能的分配,以维持光合作用的高效进行,但其具体的组装机制还需要高分辨率的结构信息才能阐明。

近几年,笔者所在实验室分别解析了玉米和莱茵衣藻光合作用状态转换过程中形成的 PSI-LHCI-LHCII 复合物高分辨率结构^[12, 23]。在 *Zm*PSI-LHCI-LHCII 复合物中,LHCII 三聚体结合在 *PsaO* 一侧(图 4a),通过 *Lhcb2* 亚基与 PSI 核心直接相互作用,*Lhcb2* 亚基 N 端第三位的磷酸化苏氨酸结合在 PSI 表面带正电的口袋,与 PSI 核心亚基 *PsaL* 形成广泛的相互作用(图 4b),从而稳定了 LHCII 与 PSI 的结合,并解释了为什么磷酸化的 LHCII 能够结合 PSI。此外,*Lhcb2* 亚基 N 端第一、第二位的精氨酸也与 *PsaH* 和 *PsaO* 的负电性氨基酸相互作用(图 4b),进一步稳定该复合物。

在 *Cr*PSI-LHCI-LHCII 复合物中,有 2 个 LHCII 三聚体结合在 PSI 核心(图 4c),每个 LHCII 通过一个磷酸化的 *LhcbM* 单体与 PSI 核心结合。其中一个 LHCII (LHCII-2) 的结合位置与 *Zm*PSI-LHCI-LHCII 中 LHCII 结合位置非常接近(图 4d),且其磷酸化的 *LhcbM1* 亚基的 N 端 5 个氨基酸与玉米 *Lhcb2* 完全相同,其与 PSI 核心亚基的相互作用也高度相似(图 4e)。另一个 LHCII (LHCII-1) 结合在 *PsaL* 亚基附近,位于 LHCII-2 和 *Lhca2* 之间,其磷酸化的 *LhcbM5* 不仅直接结合 PSI,同时还介导 *LhcbM1* 与 PSI 核心的相互作用(图 4f),从而在稳定 LHCII-1 之外,还辅助 LHCII-2 与 PSI 核心的结合。研究表明,若将 *LhcbM5* 敲除,则衣藻中不能形成这种状态 2 复合物,而敲除 *LhcbM1* 却并不产生类似的影响^[23, 29-30]。这些结果与其结构特征一致,表明 *LhcbM5* 是莱茵衣藻光合作用状态转换所必需的。

在 PSI-LHCI-LHCII 复合物中,*PsaO* 介导了 LHCII 与 PSI 的结合,另一方面 LHCII 的存在也稳定了 *PsaO*,所以在 PSI-LHCI 结构中没有观察到的 *PsaO* 亚基,可以在玉米和莱茵衣藻 PSI-LHCI-LHCII 复合物中被构建。同时 *Cr*PSI-LHCI-LHCII 复合物中 LHCII-1 与 PSI 侧面两个捕光天线 *Lhca2-Lhca9* 互相稳定,因而在该结构中对这两个蛋白质的结构和色素都构建的更为完整。

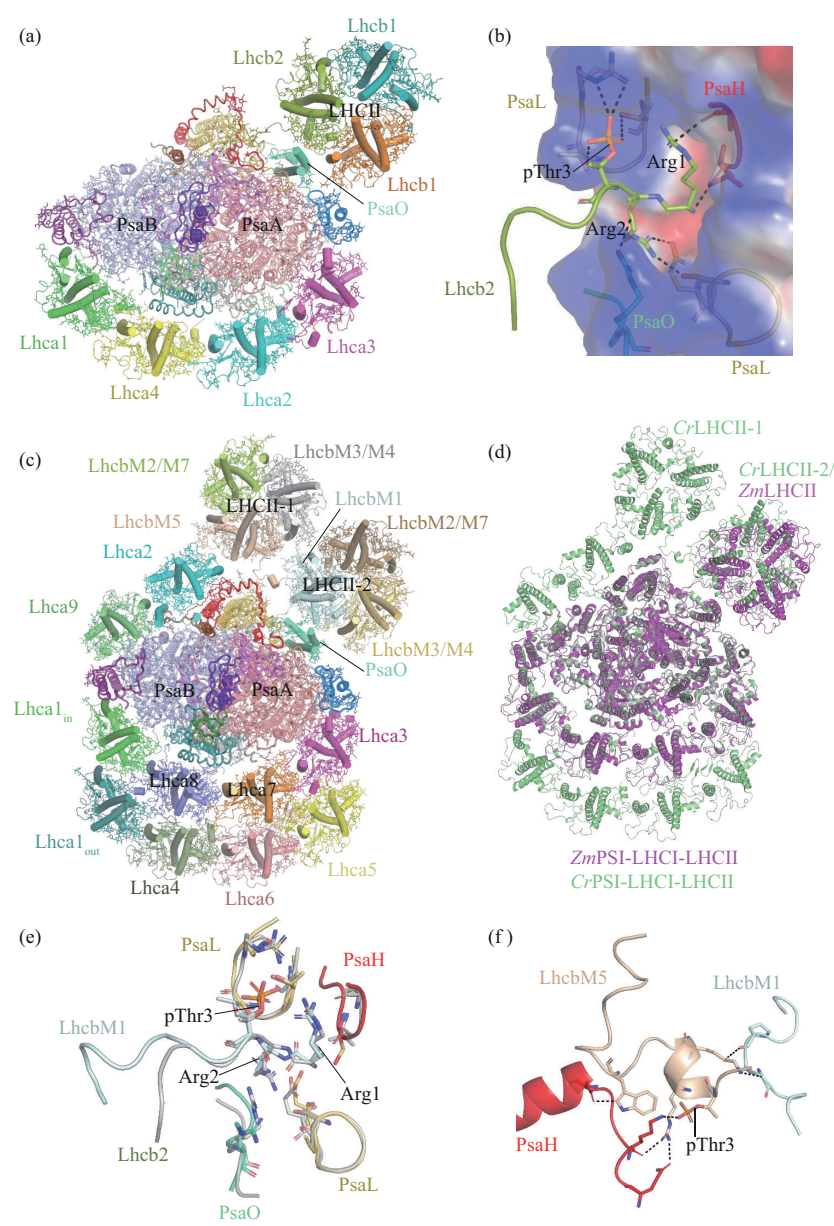


Fig. 4 Structure of photosynthetic state 2 complexes

图4 光合作用状态2复合物结构

(a) ZmPSI-LHCI-LHCII整体结构 (PDB ID: 5zji)。 (b) ZmLhcb2磷酸化N端与PsaL/PsaH/PsaO之间的相互作用, PsaL/PsaH/PsaO形成的口袋用表面电势图显示 (红色为负电势, 蓝色为正电势)。 (c) CrPSI-LHCI-LHCII整体结构 (PDB ID: 7dz7)。 (d) 玉米与莱茵衣藻PSI-LHCI-LHCII结构比较。 (e) CrLhcbM1与ZmLhcb2的N端叠合, 以及二者与PsaL/PsaH/PsaO之间的相互作用比较 (ZmPSI-LHCI-LHCII结构以灰白色显示)。 (f) CrLhcbM5与PsaH、LhcbM1之间的相互作用。(a), (c) 和 (d) 均从基质侧观察; (a) 和 (c) 中PSI核心亚基用飘带模式显示, 捕光天线用卡通模式显示。

4 小立碗藓*Pp*PSI-L

虽然磷酸化LHCII三聚体与PSI核心结合是光合作用状态2复合物的特征, 但并不是所有的PSI-LHCI-LHCII复合物都与状态转换相关, 如目前已知的苔藓模式生物小立碗藓 (*Physcomitrium patens*, *Pp*) 和金牛蛇球藻 (*Ostreococcus tauri*, *Ot*)

就存在不参与状态转换调节的PSI-LHCI-LHCII复合物^[14, 31], 这可能与物种的进化相关。

苔藓作为首批登陆的植物, 在进化上处于特殊的位置, 其PSI也表现出独特的特征^[32-33]。与绿藻和高等植物相比, 苔藓PSI具有独特和多样的捕光天线组成, 以适应不同的光环境变化, 这种多样性使得苔藓能够在各种光照条件下进行有效的光合作用

用。研究表明,小立碗藓中有至少两种不同尺寸的PSI,一种与高等植物PSI基本一样,1个PSI核心结合4个LHCI蛋白,被称为*PpPSI-S*(小PSI)^[34-35],另一种PSI被称为*PpPSI-L*(大PSI),该种类型的PSI除LHCI外,还结合有1个LHCII以及1个苔藓特有的天线蛋白Lhcb9^[32-33]。之前的研究发现,Lhcb9在该复合物的组装过程中发挥重要作用,在Lhcb9敲除的突变株中,*PpPSI-L*复合物不会形成^[33, 36]。此外,强光照时苔藓中*PpPSI-L*明显减少^[33],可能是苔藓适应不同光照环境的一种调节机制。

2023年,我们解析了*PpPSI-L*复合物高分辨率结构^[14],小立碗藓PSI核心与被子植物高度相似,但额外结合有PsaM亚基,此外,在PSI核心外部结合1个LHCII三聚体,2层LHCI捕光天线以及1个Lhcb9蛋白(图5a)。其中LHCII结合在PsaO一侧,内层LHCI天线与被子植物PSI的天线蛋白相似,结合在PsaG-PsaF-PsaK一侧,由于苔藓中缺

失Lhca4的基因,复合物中Lhca4的位置由1个Lhca2蛋白亚型替代,4个蛋白质从PsaG到PsaK方向依次是Lhca1、Lhca2.1、Lhca2.3和Lhca3,外层天线与内层天线亚基组成和排列顺序完全一样。与*CrPSI*的两层捕光天线平行排列不同,*PpPSI-L*外层的捕光天线向LHCII一侧偏移了约3个LHCI的距离,使得外层的Lhca1-o和Lhca3-o分别与内层的Lhca3-i和LHCII直接相互作用(图5a)。其特有的Lhcb9和其他具有3段跨膜螺旋的天线蛋白有相似的结构,结合8个叶绿素a、5个叶绿素b和4个类胡萝卜素(图5b),位于内、外层捕光天线与LHCII包围的空间,与PSI核心、两层LHCI天线及LHCII均有相互作用,从而解释了其在复合物组装中的重要功能。虽然小立碗藓*PpPSI-L*并不是光合作用状态转换过程中形成的,但其LHCII的一个单体同样在N端磷酸化,并且其结合位置及与PSI相互作用方式均与玉米PSI-LHCI-LHCII中的LHCII高度相似,只是其LHCII向Lhcb9方向有一

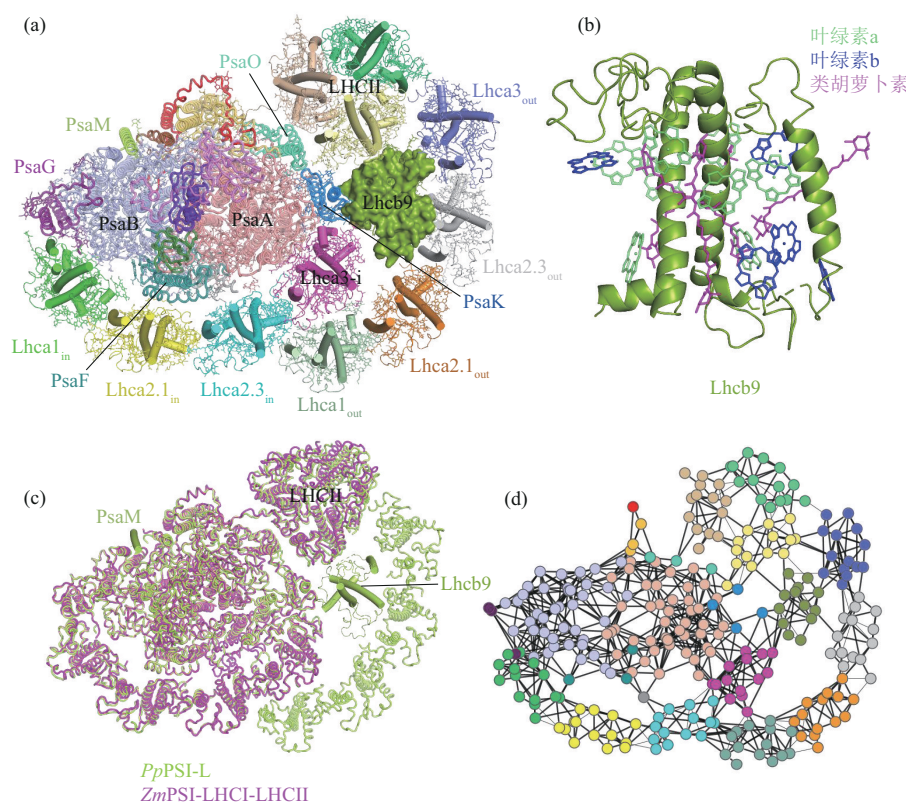


Fig. 5 Structure of *PpPSI-L* from moss *Physcomitrium patens*

图5 小立碗藓*PpPSI-L*结构

(a) 从基质侧观察*PpPSI-L*整体结构(PDB ID: 8htu)。(b) Lhcb9结构(色素分子以棒状模式显示,叶绿素a显示为绿色,叶绿素b显示为蓝色,类胡萝卜素显示为品红色)。(c) *PpPSI-L*与*ZmPSI-LHCI-LHCII*结构比较(*ZmPSI-LHCI-LHCII* PDB ID: 5zji)。(d) Förster能量共振转移(Förster resonance energy transfer, FRET)计算*PpPSI-LHCI-Lhcb9-LHCII*中的潜在能量传递。(a), (c)和(d)均从基质侧观察;(a)中PSI核心亚基用飘带模式显示,Lhcb9用表面图模式显示,其余捕光天线用卡通模式显示;(d)中每个圆点代表一个叶绿素,其颜色与(a)中的蛋白质亚基颜色相对应,圆点间的线条粗细表示能量传递效率,线条越粗,能量传递效率越高。

个很小角度的偏转 (图 5c)。

在 *Pp*PSI-L 复合物中结合大量色素分子, 天线蛋白之间形成多条高效的能量传递途径, 内层捕光天线、Lhcb9 和 LHCII 都能够直接向 PSI 核心传能, 且内层捕光天线主要是从两端的天线蛋白 Lhca1_{in} 和 Lhca3_{in} 向核心传递激发能, 这与绿藻和被子植物中 PSI 的能量传递基本一致, 外层的捕光天线同样也是通过两端的捕光天线 Lhca1_{out} 和 Lhca3_{out} 向内层捕光天线、Lhcb9 以及 LHCII 传递激发能 (图 5d)。结构分析发现, 小立碗藓 *Pp*PSI-S 和 *Pp*PSI-L 对应位置的天线组成完全一致, 且 *Pp*PSI-L 的不同天线蛋白模块之间存在灵活性, 提示苔藓 PSI 具有灵活的外周天线调节机制。

5 PSI与环式电子传递

围绕 PSI 的环式电子传递 (cyclic electron flow/transfer, CEF/CET) 是光合作用中的一个重要调节过程, 它涉及一系列蛋白质及复合物的协同作用^[37]。在该过程中, PSI 被光激发产生的电子最终传回给 PSI, 过程中形成的跨类囊体膜的质子动力势驱动 ATP 合酶产生 ATP (图 1)。植物中的 CEF 主要包括类 NADPH 脱氢酶复合物 (NADPH dehydrogenase-like complex, NDH) 依赖的和质子梯度调控蛋白 5

(proton gradient regulation 5, PGR5) - 质子梯度调控样蛋白 1 (pgr5-like photosynthetic phenotype, PGRL1) 依赖的两类^[38], 在 NDH 依赖的环式电子传递中, NDH 往往会与 PSI 形成 NDH-PSI 超大蛋白质复合物, 可能有助于环式电子传递的高效进行。研究表明, PSI 的两种捕光天线 Lhca5 和 Lhca6 在该复合物的形成和稳定中发挥了关键作用, 了解该复合物的分子结构, 对于理解光合作用的能量转换和环式电子传递调控机制具有重要意义^[39]。

2022 年, 我们课题组和来自中国科学院植物研究所的团队分别解析了拟南芥 (*Arabidopsis thaliana*, *At*) 和大麦 (*Hordeum vulgare*, *Hv*) 来源的 NDH-PSI 超大复合物的结构^[15, 40], 两个结构较为相似, 表明 1 个 NDH 可以与 2 个 PSI-LHCI 复合物结合, 并且这 2 个 PSI 的 LHCI 天线组成不同, 与以往报道的植物 PSI 天线蛋白 (Lhca1-Lhca4-Lhca2-Lhca3) 相比也不完全一样, 均有 1 个天线蛋白的替换。其中 PSI-1 中 Lhca6 替换了原来的 Lhca2 (形成 Lhca1-Lhca4-Lhca6-Lhca3 的外周天线), PSI-2 中 Lhca5 替换了原来的 Lhca4 (外周天线为 Lhca1-Lhca5-Lhca2-Lhca3), 这两个替换的 LHCI 蛋白分别介导了两侧 PSI 与 NDH 的相互作用 (图 6a), 该结构与之前的发现^[41-42], 即 Lhca5 和

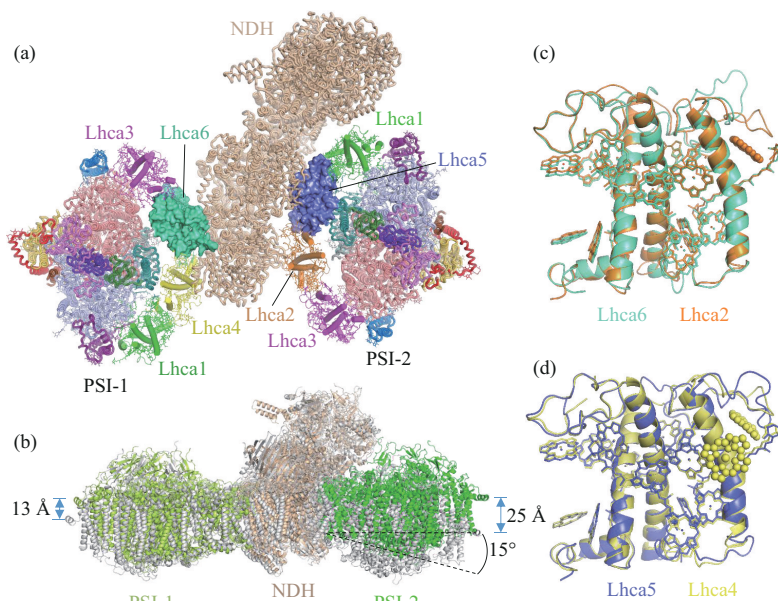


Fig. 6 Structure of NDH-PSI from *A. thaliana*

图6 拟南芥NDH-PSI结构

(a) *At*NDH-PSI整体结构 (PDB ID: 7wg5)。 (b) 拟南芥和大麦NDH-PSI结构比较 (*At*NDH-PSI中NDH、PSI-1和PSI-2分别以小麦色、浅绿色和深绿色显示, *Hv*NDH-PSI显示为灰色, PDB ID: 7f9o)。 (c) 捕光天线Lhca6与Lhca2结构比较。 (d) 捕光天线Lhca5与Lhca4结构比较。 (a) 从基质侧观察, (b) 沿膜平面观察; (a) 中PSI核心亚基和NDH用飘带模式显示, PSI捕光天线Lhca5和Lhca6用表面图模式显示, 其余捕光天线用卡通模式显示, (c) 和 (d) 中Lhca2和Lhca4相比Lhca6和Lhca5多结合的色素用球体模式显示, 其余用棒状模式显示。

Lhca6 只在与 NDH 结合的 PSI 中可以检测到,而在单独存在的 PSI 中没有检测到是一致的。复合物中相比于 PSI-2, PSI-1 与 NDH 的相互作用更紧密,且拟南芥和大麦的 NDH-PSI 复合物叠合也显示 PSI-2 与 NDH 之间的夹角在两个复合物中差别更大(图 6b),表明 PSI-1 与 NDH 的结合更加稳定,与以往报道的 NDH-PSI 复合物中存在一种只结合 PSI-1 的复合物形式相一致^[39, 43]。相比于 Lhca2 和 Lhca4, Lhca6 和 Lhca5 结合的叶绿素分子更少(分别少结合 1 个和 2 个叶绿素)(图 6c, d),表明在进化过程中,植物可以部分牺牲其 PSI 的光吸收能力来形成 NDH-PSI 复合物,以便更好地执行环式电子传递的功能。

6 展 望

目前,在 PSI 高效捕获和转换光能及其参与光合作用调控的结构基础研究方面已经取得了多项成果,使人们对这一领域有了较为深入的认识,尽管如此,目前仍有很多未解决的问题。如高等植物 PSI 是由绿藻 PSI 进化而来的,但其外层及侧面的捕光天线在进化过程中如何一步步丢失的仍然未知,寻找一种进化上处于两者之间的物种,研究其 PSI 结构或许可以解决这一问题。围绕 PSI-CEF 还有许多未知的问题,如是否存在不同结合方式、结合比例的 NDH-PSI 复合物还有待进一步的研究,此外, PGR5-PGRL1 依赖的环式电子传递中, PGR5-PGRL1 与 PSI 之间是否会形成复合物目前还没有结构方面的证据, Cyt *b₆f* 作为环式电子传递中另外一个重要的复合物,可能会与 PSI 结合形成更大的复合物^[43-44],甚至与 PSI、NDH 或 PGR5-PGRL1 等形成超大复合物也并非没有可能。此外,有众多报道表明 PSI 可以与 PSII 形成复合物^[45-46],由于 PSI 中的 P700 具有高效的能量猝灭能力,当强光照时, PSII 吸收的能量可能会直接传递到 PSI 上,从而达到光保护的自的,来自于一种红藻——紫球藻 (*Porphyridium purpureum*) 的 PBS-PSII-PSI-LHC 原位结构已经报道^[47],植物中 PSII-PSI 是否存在及其可能的组装方式尚不清楚。相信随着蛋白质原位结构解析方法的进一步发展, PSI 上一些结合不稳定的蛋白质亚基或由 PSI 参与形成的不稳定超大复合物的结构都将得到解析,为更加深入地理解 PSI 及其参与的光合作用调控的机制奠定基础。

PSI 具有极高的光能转化效率,因而针对 PSI

的研究不仅具有重要的理论意义,而且有广泛的应用前景。基于光系统的作用机制和调控机理来改造植物,获得高产量是重要的研究方向^[48-49];此外,目前很多研究集中在利用 PSI 制备光电转换装置^[50],为发展可再生清洁能源提供思路。综上所述, PSI 作为光合作用中的关键组成部分,其结构基础和调控机制是了解光合作用高效进行的关键所在。通过深入研究 PSI 及其相关复合物的结构和功能,可以更好地理解光合作用的本质和调控机制,为进一步提高光合作用的效率和光合生物的适应性提供理论支持,为未来的农业生产、生态保护以及生物能源开发等领域提供重要的理论基础。

参 考 文 献

- [1] Caffarri S, Tibiletti T, Jennings R C, *et al.* A comparison between plant photosystem I and photosystem II architecture and functioning. *Curr Protein Pept Sci*, 2014, **15**(4): 296-331
- [2] Nelson N. Plant photosystem I—the most efficient nanophotochemical machine. *J Nanosci Nanotechnol*, 2009, **9**(3): 1709-1713
- [3] Fromme P, Jordan P, Krauss N. Structure of photosystem I. *Biochim Biophys Acta*, 2001, **1507**(1-3): 5-31
- [4] Golbeck J H. Photosystem I: the light-driven plastocyanin:ferredoxin oxidoreductase. Dordrecht: Springer Science & Business Media, 2007
- [5] Busch A, Hippler M. The structure and function of eukaryotic photosystem I. *Biochim Biophys Acta*, 2011, **1807**(8): 864-877
- [6] Suga M, Shen J R. Structural variations of photosystem I-antenna super complex in response to adaptations to different light environments. *Curr Opin Struct Biol*, 2020, **63**: 10-17
- [7] Galka P, Santabarbara S, Khuong T T H, *et al.* Functional analyses of the plant photosystem I-light-harvesting complex II super complex reveal that light-harvesting complex II loosely bound to photosystem II is a very efficient antenna for photosystem I in state II. *Plant Cell*, 2012, **24**(7): 2963-2978
- [8] Yamori W, Shikanai T. Physiological functions of cyclic electron transport around photosystem I in sustaining photosynthesis and plant growth. *Annu Rev Plant Biol*, 2016, **67**: 81-106
- [9] Jordan P, Fromme P, Witt H T, *et al.* Three-dimensional structure of cyanobacterial photosystem I at 2.5 Å resolution. *Nature*, 2001, **411**: 909-917
- [10] Ben-Shem A, Frolow F, Nelson N. Crystal structure of plant photosystem I. *Nature*, 2003, **426**: 630-635
- [11] Qin X, Suga M, Kuang T, *et al.* Photosynthesis. Structural basis for energy transfer pathways in the plant PSI-LHCI super complex. *Science*, 2015, **348**(6238): 989-995
- [12] Pan X, Ma J, Su X, *et al.* Structure of the maize photosystem I super complex with light-harvesting complexes I and II. *Science*, 2018, **360**(6393): 1109-1113

- [13] Su X, Ma J, Pan X, *et al.* Antenna arrangement and energy transfer pathways of a green algal photosystem-I-LHCI super complex. *Nat Plants*, 2019, **5**(3): 273-281
- [14] Sun H, Shang H, Pan X, *et al.* Structural insights into the assembly and energy transfer of the Lhcb9-dependent photosystem I from moss *Physcomitrium patens*. *Nat Plants*, 2023, **9**(8): 1347-1358
- [15] Su X, Cao D, Pan X, *et al.* Supramolecular assembly of chloroplast NADH dehydrogenase-like complex with photosystem I from *Arabidopsis thaliana*. *Mol Plant*, 2022, **15**(3): 454-467
- [16] Wang J, Yu L J, Wang W, *et al.* Structure of plant photosystem I-light harvesting complex I super complex at 2.4 Å resolution. *J Integr Plant Biol*, 2021, **63**(7): 1367-1381
- [17] Nelson N, Yocum C F. Structure and function of photosystems I and II. *Annu Rev Plant Biol*, 2006, **57**: 521-565
- [18] Rivadossi A, Zucchelli G, Garlaschi F M, *et al.* The importance of PS I chlorophyll red forms in light-harvesting by leaves. *Photosynth Res*, 1999, **60**(2): 209-215
- [19] Croce R, Dorra D, Holzwarth A R, *et al.* Fluorescence decay and spectral evolution in intact photosystem I of higher plants. *Biochemistry*, 2000, **39**(21): 6341-6348
- [20] Drop B, Webber-Birungi M, Fusetti F, *et al.* Photosystem I of *Chlamydomonas reinhardtii* contains nine light-harvesting complexes (Lhca) located on one side of the core. *J Biol Chem*, 2011, **286**(52): 44878-44887
- [21] Le Quiniou C, Tian L, Drop B, *et al.* PSI-LHCI of *Chlamydomonas reinhardtii*: increasing the absorption cross section without losing efficiency. *Biochim Biophys Acta*, 2015, **1847**(4/5): 458-467
- [22] Mozzo M, Mantelli M, Passarini F, *et al.* Functional analysis of Photosystem I light-harvesting complexes (Lhca) gene products of *Chlamydomonas reinhardtii*. *Biochim Biophys Acta*, 2010, **1797**(2): 212-221
- [23] Pan X, Tokutsu R, Li A, *et al.* Structural basis of LhcbM5-mediated state transitions in green algae. *Nat Plants*, 2021, **7**(8): 1119-1131
- [24] Qin X, Pi X, Wang W, *et al.* Structure of a green algal photosystem I in complex with a large number of light-harvesting complex I subunits. *Nat Plants*, 2019, **5**(3): 263-272
- [25] Vanselow C, Weber A P M, Krause K, *et al.* Genetic analysis of the Photosystem I subunits from the red alga, *Galdieria sulphuraria*. *Biochim Biophys Acta*, 2009, **1787**(1): 46-59
- [26] Murata N. Control of excitation transfer in photosynthesis I. Light-induced change of chlorophyll a fluorescence in *Porphyridium cruentum*. *Biochim Biophys Acta*, 1969, **172**(2): 242-251
- [27] Kouril R, Zygadlo A, Arteni A A, *et al.* Structural characterization of a complex of photosystem I and light-harvesting complex II of *Arabidopsis thaliana*. *Biochemistry*, 2005, **44**(33): 10935-10940
- [28] Nawrocki W J, Santabarbara S, Mosebach L, *et al.* State transitions redistribute rather than dissipate energy between the two photosystems in *Chlamydomonas*. *Nat Plants*, 2016, **2**: 16031
- [29] Takahashi H, Iwai M, Takahashi Y, *et al.* Identification of the mobile light-harvesting complex II polypeptides for state transitions in *Chlamydomonas reinhardtii*. *Proc Natl Acad Sci USA*, 2006, **103**(2): 477-482
- [30] Ferrante P, Ballottari M, Bonente G, *et al.* LHCBM1 and LHCBM2/7 polypeptides, components of major lhci complex, have distinct functional roles in photosynthetic antenna system of *Chlamydomonas reinhardtii*. *J Biol Chem*, 2012, **287**(20): 16276-16288
- [31] Ishii A, Shan J, Sheng X, *et al.* The photosystem I super complex from a primordial green alga *Ostreococcus tauri* harbors three light-harvesting complex trimers. *Elife*, 2023, **12**: e84488
- [32] Iwai M, Grob P, Iavarone A T, *et al.* A unique supramolecular organization of photosystem I in the moss *Physcomitrella patens*. *Nat Plants*, 2018, **4**(11): 904-909
- [33] Pinnola A, Alborese A, Nosek L, *et al.* A LHCB9-dependent photosystem I mega complex induced under low light in *Physcomitrella patens*. *Nat Plants*, 2018, **4**(11): 910-919
- [34] Yan Q, Zhao L, Wang W, *et al.* Antenna arrangement and energy-transfer pathways of PSI-LHCI from the moss *Physcomitrella patens*. *Cell Discov*, 2021, **7**(1): 10
- [35] Gorski C, Riddle R, Toporik H, *et al.* The structure of the *Physcomitrium patens* photosystem I reveals a unique Lhca2 paralogue replacing Lhca4. *Nat Plants*, 2022, **8**(3): 307-316
- [36] Iwai M, Yokono M, Kono M, *et al.* Light-harvesting complex Lhcb9 confers a green alga-type photosystem I super complex to the moss *Physcomitrella patens*. *Nat Plants*, 2015, **1**: 14008
- [37] Zhang S, Zou B, Cao P, *et al.* Structural insights into photosynthetic cyclic electron transport. *Mol Plant*, 2023, **16**(1): 187-205
- [38] Shikanai T, Yamamoto H. Contribution of cyclic and pseudo-cyclic electron transport to the formation of proton motive force in chloroplasts. *Mol Plant*, 2017, **10**(1): 20-29
- [39] Kouřil R, Strouhal O, Nosek L, *et al.* Structural characterization of a plant photosystem I and NAD(P)H dehydrogenase super complex. *Plant J*, 2014, **77**(4): 568-576
- [40] Shen L, Tang K, Wang W, *et al.* Architecture of the chloroplast PSI-NDH super complex in *Hordeum vulgare*. *Nature*, 2022, **601**(7894): 649-654
- [41] Peng L, Fukao Y, Fujiwara M, *et al.* Efficient operation of NAD(P)H dehydrogenase requires super complex formation with photosystem I via minor LHCI in *Arabidopsis*. *Plant Cell*, 2009, **21**(11): 3623-3640
- [42] Zolla L, Rinalducci S, Timperio A M. Proteomic analysis of photosystem I components from different plant species. *Proteomics*, 2007, **7**(11): 1866-1876
- [43] Sathish Yadav K N, Semchonok D A, Nosek L, *et al.* Super complexes of plant photosystem I with cytochrome b6f, light-harvesting complex II and NDH. *Biochim Biophys Acta*, 2017, **1858**(1): 12-20
- [44] Iwai M, Takizawa K, Tokutsu R, *et al.* Isolation of the elusive super complex that drives cyclic electron flow in photosynthesis. *Nature*, 2010, **464**(7292): 1210-1213
- [45] Furukawa R, Aso M, Fujita T, *et al.* Formation of a PSI-PSII mega complex containing LHCSR and PsbS in the moss *Physcomitrella patens*. *J Plant Res*, 2019, **132**(6): 867-880

- [46] Yokono M, Takabayashi A, Akimoto S, *et al.* A mega complex composed of both photosystem reaction centres in higher plants. *Nat Commun*, 2015, **6**: 6675
- [47] You X, Zhang X, Cheng J, *et al.* *In situ* structure of the red algal phycobilisome-PSII-PSI-LHC mega complex. *Nature*, 2023, **616**(7955): 199-206
- [48] Chen J H, Chen S T, He N Y, *et al.* Nuclear-encoded synthesis of the D1 subunit of photosystem II increases photosynthetic efficiency and crop yield. *Nat Plants*, 2020, **6**(5): 570-580
- [49] Głowacka K, Kromdijk J, Kucera K, *et al.* Photosystem II subunit S overexpression increases the efficiency of water use in a field-grown crop. *Nat Commun*, 2018, **9**(1): 868
- [50] Kothe T, Pöller S, Zhao F, *et al.* Engineered electron-transfer chain in photosystem I based photocathodes outperforms electron-transfer rates in natural photosynthesis. *Chemistry*, 2014, **20**(35): 11029-11034

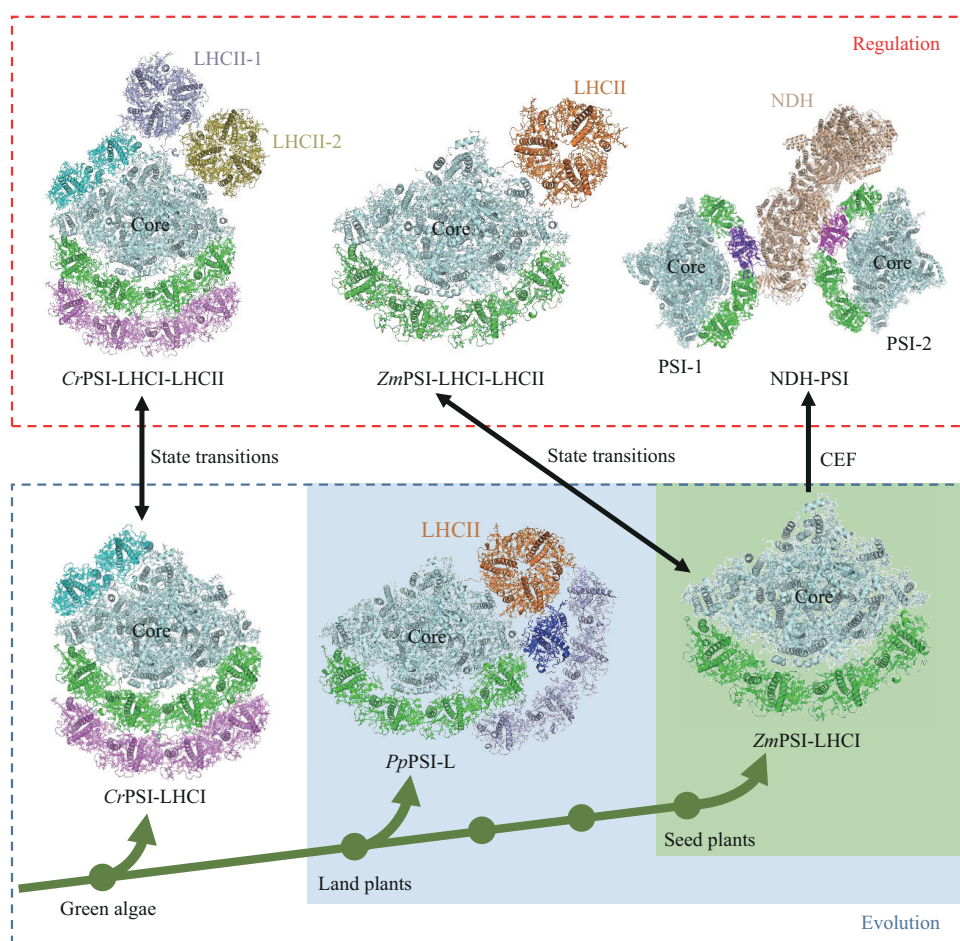
Structural Basis of Photosystem I and Its Photosynthesis Regulation in Green Plants*

SU Xiao-Dong^{1,2}, LI Mei¹**

⁽¹⁾National Laboratory of Biomacromolecules, Institute of Biophysics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100101, China;

⁽²⁾College of Life Sciences, University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China)

Graphical abstract



* This work was supported by grants from The National Natural Science Foundation of China (31930064, 32171183, 32371247), the Youth Innovation Promotion Association at the Chinese Academy of Sciences (Y2022038), and the CAS Project for Young Scientists in Basic Research (YSBR-015).

** Corresponding author.

Tel: 86-10-64888511, E-mail: meili@ibp.ac.cn

Received: June 26, 2024 Accepted: August 21, 2024

Abstract Photosynthesis is one of the most important chemical reactions on earth. Oxygenic photosynthetic organisms convert solar energy into chemical energy and release oxygen, thus sustaining almost all life on this planet. Oxygenic phototrophs possess two photosystems, namely photosystem I (PSI) and photosystem II (PSII). Both photosystems are multi-subunit protein complexes embedded in the thylakoid membrane and bind numerous pigment molecules, thereby can efficiently harvest light energy and transfer it to the reaction center. PSI is one of the most efficient nano-photochemical machineries in nature. Its complex structure and sophisticated regulatory mechanisms are crucial for the high photosynthetic efficiency of oxygenic phototrophs. Eukaryotic PSI consists of a core complex where charge separation occurs and a peripheral antenna system that increases the light absorption cross section of the core. The PSI core possesses approximately 12–15 protein subunits, most of them are conserved during evolution, with only several small transmembrane subunits emerging or disappearing. The peripheral antenna system usually contains a number of light-harvesting complexes (LHCs). In contrast to the core, the protein composition and arrangement of LHC antennae vary considerably among different species of photosynthetic organisms. Previous results showed that in angiosperm plants (such as *Pisum sativum* and *Zea mays*), the PSI core binds four LHC proteins arranged as an arc-shaped belt, whereas in green algae, the PSI core is associated with more LHCs, presumably a result of adaption to the low-light aquatic environment. In addition, structures of several green algal PSI complexes indicated that green algae can dynamically regulate their light-harvesting capability by adjusting the size of PSI antennae, thereby better adapting to the changing natural environment. In addition to the light harvesting and energy conversion, PSI is also involved in several photosynthetic regulatory processes, including state transitions and cycle electron flow/transfer (CEF/CET). State transitions represent a short-term regulatory mechanism that balances the energy distribution between the two photosystems. During the process of state transitions, when PSII is preferentially excited, a portion of the PSII antenna, the major light-harvesting complex II (LHCII), is phosphorylated, and these phosphorylated LHCII bind to the PSI core, forming the PSI-LHCI-LHCII complex. This process is reversible, and when PSI is preferentially excited, LHCII is dephosphorylated, detaches from the PSI and binds to the PSII. Previous reports revealed that although higher plants and green algae possess a similar process of state transitions, their PSI-LHCI-LHCII complexes exhibit specific characteristics in addition to common conserved features. CEF is another important regulatory process in which the PSI participates. In NDH (NAD(P)H dehydrogenase-like complex) dependent CEF, PSI can form supercomplex with NDH to improve the electron transfer efficiency. Previous reports suggested that the PSI bound to NDH and the PSI not bound to NDH possess different LHC compositions, and the exact protein identity and location were recently unraveled based on high-resolution structures. In the past two decades, a number of structures of PSI and PSI-containing complexes have been determined. These structural data provide important information concerning the protein assembly and pigment arrangement of these complexes, allowing for a deeper understanding of the structure and function of green plant PSI. In this review, we summarize the research progresses on the structure of green plant PSIs and PSI-containing complexes involved in photosynthetic regulation, primarily based on the results obtained in our laboratory, and discuss the current state of knowledge concerning the antenna arrangement and the regulatory mechanisms of plant PSI.

Key words photosystem I, protein structure, photosynthetic regulation, state transitions, cycle electron flow/transfer

DOI: 10.16476/j.pibb.2024.0270