

## ИЗУЧЕНИЕ ФОТОАКТИВАЦИИ БЕЛКА ОСР МЕТОДАМИ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Судаков Р.В., Зленко Д.В.

Кафедра биофизики, биологический факультет, МГУ

У всех фотосинтезирующих организмов на ярком свете возможно формирование синглетного состояния хлорофилла реакционного центра, что приводит к образованию АФК. Каротиноиды участвуют в тушении флюоресценции хлорофилла, а ОСР - светочувствительный белок, переносчик каротиноида, способен переходить из оранжевой неактивной, преимущественно димерной формы в красную, способную взаимодействовать с фикобилипротеинами и рассеивать энергию возбуждения в тепло [1]. Характер и механизм изменений в структуре ОСР при его активации до сих пор точно не известен.

В экспериментальных исследованиях[1–2] было показано, что при замене ключевых аминокислот Arg155, Glu244, W290 и Y44 происходит нарушение обратной (R155E) или прямой (W290F и Y44S) фотоконверсии [2]. ОСР в неактивной форме представлен димером, а в активной красной — мономером [1]. Также известно, что отщепленный N-концевой домен (RCP) ведет себя аналогично красной форме ОСР.

Целью исследований *in silico* было изучить конформационную динамику глобул ОСР дикого типа и мутантов с целью выявления деталей молекулярных механизмов фотоконверсии. При анализе молекулярно-динамических траекторий на основе моделей белка ОСР и мутантов длиной 700-800 нс было показано, что при разрушении соляного мостика Arg155 – Glu244 расстояние между доменами увеличивается вопреки предположению [2] о влиянии соляного мостика на взаиморасположение доменов. При разрушении водородной связи между остатком 290 и хромофором увеличивается подвижность двугранного угла между полиеновой цепью и циклогексаеновым кольцом каротиноида, что согласуется с предположением [3] о влиянии W290 на фотоактивацию. В расчете модели белка дикого типа было показано увеличение среднеквадратичного отклонения структуры N-концевого домена от таковой в кристалле, в то время, как конформация C-концевого домена значительно более стабильна, кроме того, двугранные углы полиеновой цепочки HEQ ведут себя аналогично таковым в модели RCP, что может косвенно свидетельствовать о начале фотоактивации белка в модели дикого типа.

### Литература

1. Kirilovsky, D., and Kerfeld, C. The Orange Carotenoid Protein: a blue-green light photoactive protein. *Photochem. Photobiol. Sci.*, 2013, vol. 12(7), pp 1135–43.
2. Wilson, A., Gwizdala, M., Mezzetti, A., et. al. The Essential Role of the N-Terminal Domain of the Orange Carotenoid Protein in Cyanobacterial Photoprotection: Importance of a Positive Charge for Phycobilisome Binding. *Plant Cell* 2012, vol. 24(5), pp. 1972-83.
3. Wilson, A., Kinney, J., Zwart, P., et al. Structural Determinants Underlying Photoprotection in the Photoactive Orange Carotenoid Protein of Cyanobacteria. *The Journal of Biological Chemistry*. 2010, . vol. 285(24), pp. 18364 –18375.