

## МОЛЕКУЛЯРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ФОТОФИЗИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ФЛУОРЕСЦЕНТНЫХ БЕЛКОВ НА ОСНОВЕ ФЛАВИНА

Хренова М.Г., Коц Е.Д., Немухин А.В.<sup>1</sup>

МГУ имени М.В. Ломоносова, Россия, 119991, Москва, Ленинские горы, 1/3  
+74959392035, wasabiko@lcc.chem.msu.ru

<sup>1</sup>ИБХФ РАН им. Н.М. Эмануэля РАН, 119334, Москва, ул. Косыгина, 4

Флуоресцентные белки на основе флавина (FbFP) являются перспективными для исследований *in vivo* в клетках и тканях и произошли от светочувствительного белка LOV (light, oxygen and voltage sensor). Яркая флуоресценция, не зависящая от присутствия кислорода, небольшой размер белка, а также мономерная форма являются основными достоинствами представителей этого семейства. Недавние исследования показали, что FbFP с улучшенными характеристиками являются альтернативой широко известным белкам семейства GFP. На сегодняшний день разработаны несколько флуоресцентных белков, отличающихся квантовыми выходами флуоресценции и фотостабильностью, однако все они имеют практически совпадающие значения максимумов полос поглощения и флуоресценции.

Основываясь на результатах молекулярного моделирования, мы предлагаем новые аминокислотные замены, приводящие к формированию флуоресцентных белков со смещенными положениями максимумов полос поглощения и флуоресценции. В работе применяется комбинированный метод квантовой механики / молекулярной механики для поиска равновесных геометрических конфигураций в основном электронном состоянии, а также для описания конформационной динамики таких систем методом молекулярной динамики с КМ/ММ потенциалами. Для расчета энергий вертикальных переходов применялся многоконfigurационный метод самосогласованного поля в полном пространстве активных орбиталей CASCF с последующим учетом поправок по теории возмущений в варианте ХМCQDPT2.

Работа поддержана проектом РФФИ 16-03-00078.