

ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ДИНАМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ КАРОТИНОИДОВ И КАРОТИНОИД-СОДЕРЖАЩИХ БЕЛКОВ

Ярошевич И.А.

МГУ им. М.В. Ломоносова

Каротиноиды являются одними из самых широко распространенных в природе классов пигментов. Эти соединения присущи как в животным, так и в растениям, как про-, так и эукариотическим клеткам, на данный момент выделено более 500 различных каротиноидов биологического происхождения. Благодаря характерным для каротиноидов молекулярным свойствам эти пигменты выполняют целый ряд биологических функций, которые можно разделить на две группы: структурные и энергетические функций. Каротиноиды относятся к классу тетратерпеноидов с характерной длинной sp^2 -сопряженной цепи 9-13 связей (длина присущая большинству каротиноидов природного происхождения), такой длинный жесткий неразветвленный углеродный скелет обеспечивает высокую конформационную однородность молекул в различных средах (жирных каплях, липидных мембранах и белковом матриксе). В работе было проведено исследование конформационных особенностей каротиноидов и их влияния на процессы пространственного распределения каротиноидов в средах, процессы агрегации каротиноидов, процессы связанные с потерей конформационной однородности. С помощью методов вычислительной квантовой химии исследованы равновесные конформации различных каротиноидов, энергетические барьеры вращения двугранных углов вдоль цепи сопряженных связей, энергии электронных возбуждений для каротиноидов в различных конформациях. На основании проведенного исследования сформулирована гипотеза о механизме ранних этапов фотоактивации бактериального каротиноид-содержащего белка ОСР (Orange Carotenoid Protein). Методами молекулярной динамики проведено исследование ОСР в солевых растворах. Исследована динамика образования и разрыва водородных связей между аминокислотными остатками Y201 и W288 и молекулой каротиноида. Изучена молекулярная динамика белка ОСР дикого типа (WT), и мутантов Y201A, W288A и Y201A+W288A. Исследована динамика белка ОСР содержащего модельный каротиноид, отвечающий свойствам возбужденного электронного состояния этой молекулы. Результаты исследования методом молекулярной динамики дополняют теоретическое исследование методами квантовой химии процесса фотоактивации белка ОСР.