

## ЭЛЕКТРОСТАТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ГАЛОГЕНЗАМЕЩЁННОГО ТИРОЗИНА

Сурков М.М., Ярошевич И.А.

Кафедра биофизики, Биологический факультет, Московский государственный университет им. М.В.Ломоносова;

Оранжевый каротиноидный белок (ОСР) – фотопротекторный белок цианобактерий, регулирующий их фотосинтетическую активность. В качестве хромофора в данном белке выступает молекула кето-каротиноида, связанного водородными связями с остатками тирозина (TYR201) и триптофана (TRP288). При этом, образование данных водородных связей снижает вероятность фотоактивации ОСР и уменьшает его квантовый выход флуоресценции. Замена атома водорода в мета-положении TYR201 на атом иода приводит к предпочтительному образованию внутримолекулярной водородной связи ОН-группы с атомом галогена, и, как следствие, к значительному увеличению квантового выхода флуоресценции ОСР, снижая время жизни возбуждённого состояния. В данной работе исследуются электростатические свойства галогензамещённого в мета-положении тирозина (TyrF, TyrCl, TyrBr, TyrI) в сравнении с обычным тирозином (TyrH).

Для каждого варианта тирозина рассчитывался электростатический потенциал в каждой точке в некотором объёме вокруг молекулы. Квантово-химические расчеты производились с использованием пакета программ ORCA 5.0 [1]. Первичная оптимизация геометрии молекулы производилась методом HF-3с. Расчёт электростатического потенциала производился методом PBE0 в базисе def2-SVP.

Результаты расчетов показывают, что введение галогена в структуру тирозина изменяет распределение электронных плотностей вокруг атомов. Полученные результаты открывают возможность для теоретического дизайна новых биотехнологических конструкций на основании атипичных галоген-содержащих аминокислот.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-74-00012 (<https://rscf.ru/project/22-74-00012/>).

### Литература.

1. Пакет программ ORCA 5.0 URL: <https://orcaforum.kofo.mpg.de/>