

# ПРЕДСКАЗАНИЕ САЙТОВ ДЛЯ НАИБОЛЕЕ ЭФФЕКТИВНОГО НАПРАВЛЕННОГО МУТАГЕНЕЗА ОРАНЖЕВОГО КАРОТИНОИДНОГО БЕЛКА

Мамчур А.А., Ярошевич И.А.

Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, Биологический факультет, кафедра биофизики, Россия, 119234, г. Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 12

Оранжевый каротиноидный белок (ОСР) играет важную роль в фотосинтетическом аппарате цианобактерий. Он представляет собой фоторецептор с молекулярной массой 35 кДа, который активируется синим светом и состоит из двух доменов – полностью  $\alpha$ -спирального N-концевого домена и смешанного  $\alpha$ -спирального/ $\beta$ -листового C-концевого домена, между которыми нековалентно закреплена молекула кантаксантина, необходимая для фотоактивности. Особенностью ОСР является использование каротиноидов в качестве хромофоров. Ранее в наших исследованиях методом молекулярной динамики уже было показано падение электростатического потенциала вдоль  $\pi$ -сопряжённой цепи каротиноида, которое наблюдается в каротиноид-связывающем кармане ОСР [1].

В данном исследовании был продолжен анализ проведенной молекулярно-динамической симуляции с целью предсказать сайты, направленный мутагенез в которых наиболее эффективно изменит оптические свойства молекулы при сохранении третичной структуры белка.

Для получения траектории был проведён расчёт молекулярной динамики темнового варианта ОСР длительностью 1 мкс с использованием программного пакета GROMACS версии 2020.1 и силового поля OPLS-AA. Шаг интегрирования – 1 фс, температура – 300К (V-rescale), давление – 1 атм (Parrinello-Rahman). Белок был растворён в воде (модель TIP4P), 7 ионов натрия были добавлены для нейтрализации системы. Анализ данных проводился с помощью языка программирования Python версии 3.9.12.

Основная гипотеза состоит в необходимости внесения изменений в электростатический потенциал, формируемый аминокислотами белка на атомах каротиноида. В связи с чем основными кандидатами для сайт-направленного мутагенеза стали аминокислоты, взаимодействующие с каротиноидом. Для оценки их вклада в поддержание третичной структуры ОСР были построены и проанализированы карты контактов. Стабильными считались контакты длительностью более 50% траектории МД. При этом наиболее перспективным сайтом оказался Glu244.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-74-00012.

## Литература.

1. Мамчур А. А., Ярошевич И. А. Изучение электростатической природы белок-лигандного взаимодействия в оранжевом каротиноидном белке // СБОРНИК НАУЧНЫХ ТРУДОВ VII СЪЕЗДА БИОФИЗИКОВ РОССИИ: в 2 томах. — Т. 1. — Типография ФГБОУ ВО КубГТУ Краснодар, Россия: 2023. — С. 51–52.