**Зависимость эффективности окислительной фотоконверсии зеленого флуоресцентного белка от длины волны возбуждения**

***Хайбрахманов А. И.***

*Студент, 4 курс специалитета*

*Московский государственный университет имени М.В. Ломоносова,*

*химический факультет, Москва, Россия*

*E-mail: blackwood168@gmail.com*

Зеленый флуоресцентный белок (GFP) может подвергаться окислительной фотоконверсии, протекающей вследствие переноса электрона с анионной хромофорной группы белка на молекулы окислителя при возбуждении в видимом диапазоне [1]. На сегодняшний день низкий квантовый выход фотоконверсии не позволяет использовать белок GFP в качестве биосенсора на различные окислители в живых клетках. Однако благодаря неадиабатическому характеру процесса появляется возможность влиять на его скорость за счет возбуждения определенных колебательных мод. Целью данной работы является развитие теоретических подходов для изучения механизма фотопереноса электрона в зависимости от длины волны возбуждения и повышение квантового выхода окислительной фотоконверсии белка GFP.

В данной работе разработаны и реализованы метод расчета вибронных спектров в модели линейной связи с учетом термической заселенности колебательных мод в основном электронном состоянии и метод расчёта неравновесной заселённости колебательных уровней различных мод в электронно-возбужденном состоянии в зависимости от длины волны возбуждения. Параметры вибронной модели были получены с использованием многоконфигурационной квазивырожденной теории возмущений второго порядка в варианте XMCQDPT2-CASSCF(14,13)/(aug)-cc-pVDZ//EFP. С помощью разработанных методов рассчитаны спектр поглощения белка GFP при переходе S0 → S1 и неравновесные заселенности колебательных мод хромофорной группы в состоянии S1 в белковом окружении в зависимости от длины волны возбуждения.

Показано, что наиболее активным при фотовозбуждении и переносе электрона является высокочастотное валентное колебание двойных связей сопряженной системы. Эффективность переноса электрона при 457 нм оказывается на порядок больше, чем при облучении в максимуме поглощения при 490 нм, что совпадает с энергией возбуждения первого колебательного уровня активной моды. Увеличение неравновесной заселенности этой моды при фотовозбуждении в более коротковолновой области хорошо коррелирует с экспериментальными данными по увеличению квантового выхода окислительной фотоконверсии. Таким образом, подтвержден колебательный механизм фотоиндуцированного переноса электрона в белке GFP и предложен способ увеличения квантового выхода фотоконверсии белка GFP при селективном возбуждении колебания, активного при переносе электрона из S1 состояния.

*Автор выражает благодарность научному руководителю Боченковой А.В. Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 22-13-00126) с использованием оборудования Центра коллективного пользования сверхвысокопроизводительными вычислительными ресурсами МГУ имени М.В. Ломоносова.*

**Литература**

1. Bogdanov A. M., Mishin A. S., Yampolsky I. V., Belousov V. V. Green Fluorescent proteins are light-induced electron donors // Nature Chemical Biology. 2009. Vol. 5. P. 459-461.