

## Теоретическое описание паккерных состояний иононовых колец каротиноидов

Научный руководитель – Ярошевич Игорь Александрович

*Сурков Макар Максимович*

*Студент (бакалавр)*

Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, Биологический факультет, Кафедра биофизики, Москва, Россия

*E-mail: macsurmak.m02@mail.ru*

Свойства белок-пигментного комплекса определяются входящим в его состав пигментом и способом его координации в активном центре. В случае каротенопротеинов, конфигурация сайта связывания пигмента зависит от конформационной динамики каротиноида в их составе. В нашем исследовании в рамках методов молекулярного моделирования была исследована конформационная динамика пяти различных каротиноидов.

Объектами исследования были выбраны иононовые кольца астаксатина (AST), бета-каротина (BCT), кантаксатина (CAN), лютеина (LUT) и зеаксатина (ZEA). Энергии паккерных состояний рассчитаны в рамках метода молекулярной динамики с использованием пакета GROMACS [1]. Длительность симуляции составила 1 мкс для каждого каротиноида. В результате для исследованного ряда каротиноидов охарактеризованы энергетические профили паккерных состояний (паккерные карты [2]). Было показано, что барьер перехода между энергетическими минимумами для иононовых колец, содержащих 2  $sp^2$ -гибридных атома углерода (BCT, LUT, ZEA) вдвое ниже, чем для AST и CAN, содержащих в кольцах по 3  $sp^2$ -гибридных атома углерода. Для AST показано снятие энергетического вырождения для двух паккерных состояний, обусловленное образованием внутримолекулярной водородной связи.

Для каждого паккерного состояния, в рамках методов вычислительной квантовой химии с использованием пакета ORCA [3], построены профили потенциальной энергии вращения вокруг  $C_6 - C_7$  и  $C_6' - C_7'$  связей. Показана значительная модификация соответствующих профилей в зависимости от паккерного состояния боковой циклической группы.

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

### Источники и литература

- 1) Пакет программ GROMACS URL: <https://www.gromacs.org/>
- 2) Cremer, D. and Pople, J.A. (1975) General Definition of Ring Puckering Coordinates. Journal of the American Chemical Society, 97, 1354-1358.
- 3) Пакет программ ORCA 4.1 URL: <https://orcaforum.kofo.mpg.de/>