

Исследование флуктуаций электростатического потенциала в каротиноид-связывающем кармане оранжевого каротиноидного белка

Научный руководитель – Ярошевич Игорь Александрович

Яхин Тимур Хафизович

Студент (бакалавр)

Московский физико-технический институт, Москва, Россия

E-mail: tim.yahin24@mail.ru

Оранжевый каротиноидный белок является водорастворимым фоторецептором с относительно небольшой массой (35кДа), способным при освещении интенсивным сине-зеленым светом перенаправлять энергию в тепло за счет перехода в физиологически активное состояние. Он участвует в механизме защиты фотосинтетического аппарата цианобактерий от интенсивного светового излучения. Его свойства представляют собой большой интерес – на его основе могут быть созданы различные оптические зонды, фотопереключатели, системы транспортировки и адресной доставки каротиноидов.

В настоящее время механизм фотоактивации белка неизвестен. По одной из гипотез, важную роль в нём играет градиент электростатического потенциала в каротиноид-связывающем кармане [1], изменение характера электростатических взаимодействий приведет к изменению спектральных свойств белка. Целью работы является исследование зависимости электростатического потенциала от конформационных изменений белка.

В ходе работы было проведено моделирование белка дикого типа и мутантной формы (замена E244D) методом молекулярной динамики (GROMACS 2020.1). Для белка дикого типа получена траектория длительностью 1000 нс (200000 фреймов), для мутанта - 500 нс (100000 фреймов). Полученные результаты использованы для исследования зависимости флуктуаций электростатического потенциала на ядрах каротиноида от конформационных изменений системы в ходе динамики. На каждом фрейме траектории молекулярной динамики рассчитывался суммарный заряд, создаваемый белковым окружением на ядрах атомов пи-сопряженной цепи каротиноида. Далее была рассчитана дисперсия потенциала при различных выборках фреймов и ее зависимость от конформационных изменений белок-каротиноидного комплекса. Был показан отчетливый рост дисперсии при конформационных изменениях белка, при этом дисперсия имеет схожее значение на различных стабильных участках как дикого типа, так и мутантной формы. Таким образом, изменения дисперсии коррелируют с движением белка и могут служить индикатором при оценке репрезентативности выборки.

Источники и литература

- 1) Mori Y. Computational study on the color change of 3'-hydroxyechinenone in the orange carotenoid protein // Chem. Phys. Lett. 2016. Т. 652. С. 184–189.