

ИЗМЕНЕНИЕ КОНФОРМАЦИИ БЕЛКА ОСР ПРИ МУТАЦИОННЫХ ИЗМЕНЕНИЯХ

Судаков Р.В., Зленко Д.В.

Биологический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова, Россия, 119991, Москва, ул. Ленинские Горы, 1, стр. 12.

ОСР — фотоактивный белок, осуществляющий в активированной светом красной форме нефотохимическое тушение флуоресценции фикобилисом — антенных комплексов цианобактерий. В настоящей работе методом полноатомной молекулярной динамики (МД) были смоделированы структурные изменения, которые происходят при внесении точечных мутаций, способствующих (R155L, R155E, W288F) [1] либо препятствующих (Y44S, Y201F) фотоактивации ОСР [2].

Было обнаружено, что при разрушении соляного мостика между доменами в МД расчете длиной 1 мкс не происходит существенного расхождения доменов, что наблюдается в эксперименте. Показано, что при разрушении водородной связи между белком и хромофором ОСР происходит поворот кето-содержащего кольца каротиноида на 60–80°, что в целом соответствует экспериментальным наблюдениям. При удалении С-концевого домена было обнаружено, что каротиноид способен углубляться внутрь N-концевого домена, что наблюдается в эксперименте, но закрепиться внутри гидрофобного кармана не способен. Исследованные точечные мутации не оказали влияния на кривизну каротиноида в МД расчетах.

Литература

1. Kirilovsky, D., Kerfeld, C. The Orange Carotenoid Protein: a blue-green light photoactive protein. // *Photochem. Photobiol. Sci.*, vol. 12(7), 2013. P. 1135–1143.
2. Wilson, A., Gwizdala, M., Mezzetti, A., et al. The Essential Role of the N-Terminal Domain of the Orange Carotenoid Protein in Cyanobacterial Photoprotection: Importance of a Positive Charge for Phycobilisome Binding. // *Plant Cell.*, vol. 24(5), 2012. P. 1972-1983.
3. Wilson, A., Kinney, J., Zwart, P., et al. Structural Determinants Underlying Photoprotection in the Photoactive Orange Carotenoid Protein of Cyanobacteria. // *The Journal of Biological Chemistry*, vol. 285(24), 2010. P. 18364–18375.