

**Исследование конформационной динамики белка ОСР методами  
полноатомной молекулярной динамики.**

**Научный руководитель – Зленко Дмитрий Владимирович**

***Судаков Роман Владимирович***

*Студент (магистр)*

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

*E-mail: sudakovromvlad@gmail.com*

У всех фотосинтезирующих организмов на ярком свете возможно формирование синглетного состояния хлорофилла реакционного центра, что приводит к образованию АФК. Каротиноиды участвуют в тушении флюоресценции хлорофилла, а ОСР - светочувствительный белок, переносчик каротиноида, способен переходить из оранжевой неактивной, преимущественно димерной формы в красную, способную взаимодействовать с фикобилипротеинами и рассеивать энергию возбуждения в тепло [1]. Характер и механизм изменений в структуре ОСР при его активации до сих пор точно не известен. В экспериментальных исследованиях [1,2] было показано, что при замене ключевых аминокислот Arg155, Glu244, W290 и Y44 происходит нарушение обратной (R155E) или прямой (W290F и Y44S) фотоконверсии [2]. ОСР в неактивной форме представлен димером, а в активной красной мономером [1]. Также известно, что отщепленный N-концевой домен (RCP) ведет себя аналогично красной форме ОСР. Целью исследований *in silico* было исследовать конформационную динамику глобул ОСР дикого типа и мутантов с целью выявления деталей молекулярных механизмов фотоконверсии. При анализе молекулярно-динамических траекторий на основе моделей белка ОСР и мутантов длиной 700-800 нс было показано, что при разрушении соляного мостика Arg155-Glu244 расстояние между доменами увеличивается вопреки предположению [2] о влиянии соляного мостика на взаиморасположение доменов. При разрушении водородной связи между остатком 290 и хромофором увеличивается подвижность двугранного угла между полиеновой цепью и циклогексаеноновым кольцом каротиноида, что согласуется с предположением [3] о влиянии W290 на фотоактивацию. В расчете модели белка дикого типа было показано увеличение среднеквадратичного отклонения структуры N-концевого домена от таковой в кристалле, в то время, как конформация C-концевого домена значительно более стабильна, кроме того, двугранные углы полиеновой цепочки HEQ ведут себя аналогично таковым в модели RCP, что может косвенно свидетельствовать о начале фотоактивации белка в модели дикого типа.

**Источники и литература**

- 1) Kerfeld, A. C. Structure and function of the water-soluble carotenoid-binding proteins of cyanobacteria. *Photosynthesis Research* 81: 215–225, 2004.
- 2) Wilson, A., et al. Structural Determinants Underlying Photoprotection in the Photoactive Orange Carotenoid Protein of Cyanobacteria. *J. Biol. Chem.* 2010, 285:18364-18375.
- 3) Wilson, 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.* 2012 May;24(5):1972-83.