

МОДЕЛИРОВАНИЕ КОНФОРМАЦИИ МУТАНТНЫХ ФОРМ БЕЛКА ОСР

Судаков Р.В., Зленко Д.В.¹

Кафедра биофизики, биологический факультет, МГУ

Оксигенный фотосинтез сопряжен с риском образования активных форм кислорода. Избыток энергии возбуждения от антенного комплекса способен переводить хлорофилл Р680 в синглетное состояние, что ведет к образованию активных форм кислорода (АФК). Доказана роль каротиноидов в нефотохимическом тушении флуоресценции антенн и защите фотосинтетического аппарата от повреждений, вызванных АФК [1]. У цианобактерий функцию транспорта каротиноида к антенному комплексу выполняет белок ОСР, который в ответ на свет сине-зеленой спектральной полосы высокой интенсивности переходит из неактивной оранжевой формы в активную красную. Механизм фотоактивации до конца не ясен. Путем сайт-направленного мутагенеза белка ОСР удалось выяснить, что ряд остатков – R155, Y44, Y203, W290 играют ключевую роль в фотоактивации и их замена приводит к нарушению прямого (W290F, Y203F, Y44S) или обратного (R155L, R155E) фотоперехода [2,3].

Целью исследований *in silico* было установление конформационных изменений белка ОСР при внесении точечных мутаций, приводящих к нарушению прямой или обратной фотоконверсии. Были поставлены задачи оценить изменение радиуса кривизны каротиноида при внесении замены Y44S и оценить изменение расстояния между центрами масс доменов при внесении замены R155L. Также была поставлена дополнительная задача оценить энергию отрыва молекул воды, входящей в состав соляного мостика между доменами ОСР и предположить их роль в фотоактивации.

При анализе молекулярно-динамических траекторий 15 – 20 нс-расчетов было установлено, что расстояние между центрами масс доменов ОСР с заменой R155L уменьшается по отношению к таковому у белка дикого типа вопреки предположению [1] о расхождении N- и C-концевых доменов, не связанных соляным мостиком. Радиус кривизны каротиноида глобулы ОСР с заменой Y44S уменьшается, что согласуется со сделанными предположениями [2] об уменьшении радиуса кривизны 3'-гидроксиэхиненона при изменении аминокислотного состава гидрофобного кармана. Энергия отрыва молекул воды в составе соляного мостика составила приблизительно 3.5 кДж/моль, что недостаточно для прочного связывания с соляным мостиком и, следовательно, эта вода не оказывает влияния на структуру ОСР.

Литература

1. Рубин, А., Кренделева, Т.Е. Регуляция первичных процессов фотосинтеза. // Успехи биологической химии, 2003, т. 43, с. 225 – 266.
2. 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, v. 24, pp. 1972 – 1983.
3. Wilson, A. et al. Structural Determinants Underlying Photoprotection in the Photoactive Orange Carotenoid Protein of Cyanobacteria. // J. Biol. Chem. 2010, v. 285(24), pp. 18364 – 18375.