

МОЛЕКУЛЯРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЦВЕТНЫХ ЗРИТЕЛЬНЫХ РОДОПСИНОВ

Дворецкая Л.Н.

Санкт-Петербургский академический университет, лаборатория нанобиотехнологии,
Россия, 194021, Санкт-Петербург, ул. Хлопина, д.8, корпус 3, 89313462429,
LiliyaButler@gmail.com

Моделирование родопсинов, отвечающих за цветовое восприятие, на основе структур темновых сигнальных зрительных родопсинов, позволит получить их приближённую молекулярную модель и понять разницу в энергии химических связей, которая тратится при поглощении фотонов разной длины волны [1]. На данный момент пространственных структур цветных родопсинов не существует.

Актуальность работы обусловлена тем что при получении пространственных структур цветных родопсинов, возможно получить синтез, позволяющий восстановить не функционирующие родопсины в сетчатке. Таким образом, на выходном канале колбочки, будет генерироваться сигнал, в котором содержится информация о цвете, направленная на биполярные клетки. Это необходимо при заболеваниях связанных с дистрофией колбочек, такие как *CORD*, *ахроматопсия*.

Первый этап разработки это сравнение и верификация существующих методов получения аналогичных моделей, имеющих кристаллическую структуру родопсина и их мутантов, на разных моделях цветных гомологов родопсина. Наиболее успешные методы выбирались из описания и публикации рейтингов сообщества по прогнозированию различных структур и оценке текущих методов моделирования *CASP* [2][3][4]. Далее была выбрана последовательность для цветного родопсина и 5 темновых сигнальных зрительных родопсинов приближённых последовательностей. В программе *I-TASSER* получен результат модели, составленной с помощью сборки структурных фрагментов из частей шаблонов, используя молекулярную динамику копияного обмена метода Монте Карло. Таким образом, получив наиболее точный метод и применяя его к выбранным последовательностям, в дальнейшем, планируется получить модель цветного родопсина.

Литература

1. *Okada T., Sugihara M., Bondar A., Elstner M., Entel P., Buss V.* The Retinal Conformation and its Environment in Rhodopsin in Light of a New 2.2 Å Crystal Structure // *Journal of Molecular Biology*, V. 342, Issue 2, 2004, Pages 571–583.
2. *Park H., DiMaio F., Baker D.* CASP11 refinement experiments with ROSETTA // *Proteins* 2015.
3. *Khoury G.A., Tamamis P., Pinnaduwege N., Smadbeck J., Kieslich C.A., Floudas C.A.* Princeton_TIGRESS: Protein geometry refinement using simulations and support vector machines // *Proteins*, 2014, 82:794–814.
4. *Carlsen M., Røgen P.* Protein structure refinement by optimization // *Proteins*, 2015, 83:1616–1624.