

МОДЕЛИРОВАНИЕ ФОТО И ТЕРМИЧЕСКОЙ АКТИВАЦИИ РОДОПСИНА

Хренова М.Г., Боченкова А.В., Немухин А.В.

Химический факультет, Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Россия, 119991, Москва, Ленинские горы, 1/3, wasabiko@rambler.ru

Родопсин – зрительный пигмент, находящийся в палочках сетчатки глаза человека и животных. Он состоит из мембранного белка опсина, и хромофорной группы – 11-цис ретиналя, связанного с белком с образованием протонированного основания Шиффа. Единственной фотохимической реакцией зрения является цис-транс изомеризация 11-цис ретиналя. Эта реакция происходит уникально быстро – менее, чем за 0,2 пикосекунды с квантовым выходом 0,67. За это время, возможно, образуется первый фотопродукт – фотородопсин. Фотородопсин примерно за пикосекунду переходит в следующий продукт – батородопсин. Исследование столь быстрых процессов стало возможным в последние годы с появлением спектроскопических методов с высоким разрешением во времени. В 2006 году удалось получить кристаллические структуры батородопсина.

В рамках данной работы были проведены теоретические исследования структуры батородопсина с использованием комбинированного метода квантовой и молекулярной механики (КМ/ММ). Методы КМ/ММ являются одними из немногих теоретических подходов, позволяющих исследовать системы, достигающие нескольких тысяч атомов, с высокой степенью точности. Основная идея метода состоит в выделении из исследуемой системы активного центра, для описания которого используются квантово-механические модели, тогда как для описания белкового окружения достаточно подходов молекулярной механики. С использованием такого подхода были получены структура родопсина [1]. В данной работе были локализованы структуры батородопсина и переходного состояния реакции изомеризации. Для расчета колебательных и оптических спектров интермедиатов применялись современные методы квантовой химии. Рассчитанные спектральные и структурные характеристики батородопсина хорошо описывают экспериментальные данные рентгеноструктурного анализа, низкотемпературной ИК-спектроскопии и фемтосекундной КР и оптической абсорбционной спектроскопии.

Литература

1. *Bravaya K.B., Bochenkova A.V., Granovsky A.A., Nemukhin A.V. An Opsin Shift in Rhodopsin: Retinal S0–S1 Excitation in Protein, in Solution, and in the Gas Phase // J. Am. Chem. Soc., том 129, номер 43, год 2007. Стр. 13035–13042.*