

ВЛИЯНИЕ АМИНОКИСЛОТНЫХ ЗАМЕН НА СТРУКТУРУ ОСР

Судаков Р.В., Зленко Д.В.

Каф. биофизики биологического ф-та МГУ

Белок ОСР – компонент антенного комплекса фотосистемы цианобактерий, осуществляет тушение флуоресценции фикобилисомы на ярком сине-зеленом на свету. Каротиноид(ЕСN) в составе белка удерживается контактами с боковыми группами а.о, а также водородными связями между кето-группой ЕСN и а.о Trp201 и Trp280. Белок состоит из двух доменов, удерживающихся соляным мостиком, образованного а.о Arg155 и Glu244. Белок имеет две стабильные конформации – активную (ОСР^r) и неактивную (ОСР^o), фотоконверсия осуществляется на ярком свету сине-зелёного цвета[1]. Известно, что для активности белка важен аминокислотный состав гидрофобного кармана и существование соляного мостика между доменами. Фотоактивация ОСР невозможна при замене ароматических а.о в составе гидрофобного кармана либо замене Trp280 или Trp201 на а.о, не формирующие водородные связи. Замена а.о соляного мостика затрудняет (R155L) либо делает невозможной (R155E) обратную фотоконверсию [2].

Молекулярные модели (7x7x7 нм, 50 mM NaCl) были созданы на основе структур 3MG1 (WT), 3MG2 (Y44S) и 3MG3 (R155L) [3]. Были проведены расчеты МД с шагом интегрирования 1 фс, длиной 20 нс при помощи пакета программ GROMACS [4]. Показано, что в глобуле Y44S уменьшается радиус кривизны ЕСN, а в глобуле ОСР R155L, по сравнению с диким типом, уменьшается расстояние между доменами. Мутация (Y44S), не влияет на подвижность доменов и приводит к распрямлению ЕСN. В то же время, мутация(R155L) приводит к более тесному сближению доменов белка и не отражается на конформации ЕСN.

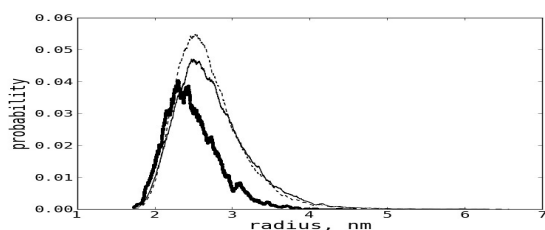
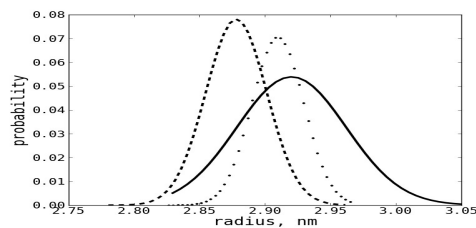


Рис. 1



Распределение величины радиуса кривизны молекулы ЕСN(л) и расстояния между центрами масс(пр) N- и С-конц. доменов ОСР для WT (—), Y44S (····) и R155L (- - -).

Работа поддержана грантом РФФ №14-14-00589.

Литература.

1. Pronk S., Páll S., Schulz R., et al. Bioinf. 29 (7): 845–854. 2013.
2. Wilson A., Kinney J., Zwart P., et al. J. Biol. Chem. 285: 18364–18375. 2010.
3. Kerfeld, C.A., Sawaya, et al. (2010) J. Biol. Chem. 285: 18364-18375.