

ОЦЕНКА ИЗМЕНЕНИЯ СВОБОДНОЙ ЭНЕРГИИ ДЕПРОТОНИРОВАНИЯ АМИНОКИСЛОТ, УЧАСТВУЮЩИХ В ПЕРЕНОСЕ ПРОТОНА, В ХОДЕ ФОТОЦИКЛА БАКТЕРИОРОДОПСИНА.

Князева А. С., Армеев Г. А., Шайтан А. К., Шайтан К. В.

Московский государственный университет им. М.В.Ломоносова,
Биологический ф-т, каф. Биоинженерии, Россия, Москва, 119991, Ленинские
горы, д. 1, стр. 73,
Тел.: +7(985)0616306,
E-mail: kniazeva.anastasiia.2015@post.bio.msu.ru

Процесс переноса протона в ходе фотоцикла бактериородопсина изучен достаточно хорошо: описаны ключевые аминокислоты, образующие цепь переноса протона, получены структуры интермедиатов фотоцикла. Однако недостаточно полно изучен механизм, определяющий возможность и однонаправленность этого процесса. Благодаря появлению структур, полученных при помощи рентгеновских лазеров, относительно недавно появилась возможность исследовать конформационные перестроения внутри бактериородопсинов в ходе фотоцикла [1].

Расчет свободной энергии депротонирования методом термодинамического интегрирования [2] для ключевых аминокислотных остатков в цепи переноса протона на разных временах после фотовозбуждения дает возможность определить энергетически наиболее выгодное положение протона в ходе фотоцикла в рамках классических силовых полей молекулярной динамики. Данным методом нами были получены энергии депротонирования четырех аминокислотных остатков (Asp 85, Asp 96, Glu 194, Glu 204) бактериородопсина в 14 конформациях, соответствующих разным стадиям фотоцикла (от O до M2) [1]. Полученные результаты позволяют проследить перенос протона между соседними звеньями цепи в течение фотоцикла и оценить энергетические эффекты этого процесса.

Работа поддержана грантом РФФИ 17-00-00166 и выполнена с использованием оборудования Центра коллективного пользования сверхвысокопроизводительными вычислительными ресурсами МГУ имени М.В. Ломоносова.

Литература

1. *Eriko Nango, Antoine Royant, et al.* A three-dimensional movie of structural changes in bacteriorhodopsin // *Science* **354**, 1552, 2016.
2. *Clara D. Christ, I. Alan E. Mark, Wilfred F., van Gunsteren* Basic Ingredients of Free Energy Calculations: A Review // *J Comput Chem* **31**, 8, 2010.