

Сравнительный анализ структурной организации каротиноидов в растворе и в составе белкового комплекса AstaP-orange1 с использованием методов молекулярной динамики

Научный руководитель – Ярошевич Игорь Александрович

Литовец Андрей Юрьевич

Студент (бакалавр)

Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, Москва, Россия

E-mail: litovetsay@my.msu.ru

Каротиноиды – биологические пигменты с разнообразным функционалом: светосборщики, антиоксиданты, стабилизаторы мембран и так далее. Потенциал использования каротиноидов значительно возрастает при включении их в комплекс с белком, специфически связывающим каротиноиды. В работе рассматриваются комплексы различных каротиноидов (PDB: AXT, 5X6, 45D) с белком AstaP-orange1 [1]. Известно, что белок изменяет спектральные свойства данных каротиноидов при связывании [3]. Недавно 3D-структура белка была разрешена [2], но молекулярные механизмы, лежащие в основе спектральных изменений, остаются неизвестными. В частности, остается неясным, каким образом белковое окружение влияет на равновесные геометрии каротиноидных молекул и распределение их конформационных состояний.

Для изучения данного эффекта был проведен ряд классических МД-симуляций: свободные каротиноиды в ацетоне (1 мкс для каждого пигмента), каротиноиды в комплексе с белком (по 300 нс x 3 для каждого пигмента). Для описания белка использовалось силовое поле AMBER ff14SB, а для каротиноидов – специальные параметры, полученные из вычислений *ab initio*. Симуляции проводились с помощью ПО GROMACS.

Анализ траекторий показал, что белковое окружение значительно изменяет распределение некоторых конформационных характеристик пигментов. В частности, наблюдается усиление асимметрии распределения паккерного состояния колец каротиноидов, для которых эта асимметрия характерна в свободном виде (AXT, 5X6). Кроме того, изменяется поверхность потенциальной энергии вращения кольца каротиноида, что проявляется в изменении относительной заселенности различных конформаций. Сопряженная полиеновая цепь, будучи жесткой структурой, не изменяется от раствора к белку: распределения длин связей, двугранных углов по сопряженной цепи остаются близкими.

Таким образом, выявлены два основных эффекта влияния белковой среды AstaP-o1 на рассматриваемые пигменты. Полученные результаты создают основу для последующего исследования электронно-возбужденных состояний для геометрий, формирующихся под действием белка, методами *ab initio*.

Источники и литература

- 1) Kawasaki S, Mizuguchi K, Sato M et al. A novel astaxanthin-binding photooxidative stress-inducible aqueous carotenoprotein from a eukaryotic microalga isolated from asphalt in midsummer. *Plant Cell Physiol* 2013;54(7):1027–40.
- 2) Maksimov E.G., Goncharuk S.A., Mineev K.S., Sluchanko N.N. Structural basis for the ligand promiscuity of the neofunctionalized, carotenoid-binding fasciclin domain protein AstaP. *Commun Biol.* 2023;6(1):471
- 3) Slonimskiy YB, Egorkin NA, Friedrich T, Maksimov EG, Sluchanko NN. Microalgal protein AstaP is a potent carotenoid solubilizer and delivery module with a broad carotenoid binding repertoire. *FEBS J.* 2022 Feb;289(4):999–1022.