

# ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ МЕХАНИЗМА БИОСИНТЕЗА ХРОМОФОРА ЗЕЛЕННОГО ФЛУОРЕСЦЕНТНОГО БЕЛКА

**В.А. Миронов, А.В. Боченкова, А.В. Немухин**

*МГУ им. М.В. Ломоносова, химический факультет, Москва*

Зеленый флуоресцентный белок (GFP) и его гомологи широко используются в биотехнологии в качестве флуоресцентных меток. Флуоресцентные свойства этих белков объясняются присутствием в их структуре хромофора, образующегося в результате автокаталитической циклизации трех аминокислотных остатков с последующим их окислением молекулярным кислородом. Известно, что окружение хромофора оказывает значительное влияние на свойства зрелого хромофора. Понимание процесса биосинтеза важно для направленного синтеза флуоресцентных белков с необходимыми свойствами, например, для синтеза красных флуоресцентных белков с пиками поглощения/эмиссии в области окна прозрачности тканей живых организмов.

В работе исследованы основные стадии реакции биосинтеза хромофра белка EGFP (Ser65Thr, PDB ID: 1EMA): стадии циклизации и окислительной дегидратации. Для последней проанализированы различные пути данного процесса. Показана каталитическая роль остатков Arg96 и Glu222: в отсутствие этих остатков повышаются энергетические барьеры данной реакции. Показаны основные стадии процесса окисления: депротонирование прекурсора хромофора, перенос электрона на молекулу кислорода на ППЭ триплетного состояния, триплет-синглетный переход и образование продукта.

Данная работа поддержана грантом РФФИ (проект № 08-03-00914-а), а также грантом Президента Российской Федерации (МК-64815.2010.4). Большая часть расчетов была выполнена с использованием ресурсов суперкомпьютерного комплекса СКИФ-МГУ «Чебышев».