

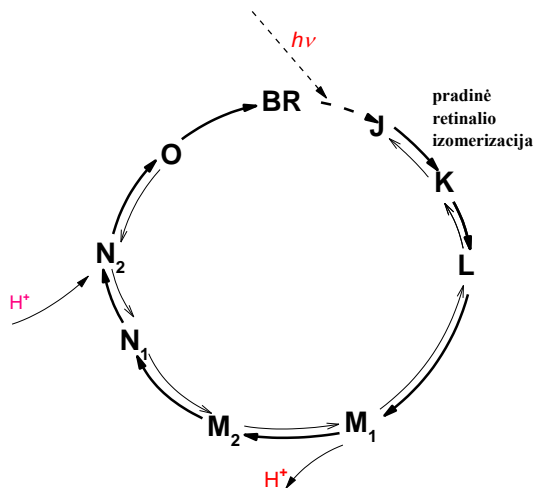
# Bakteriorodopsino baltymo aktyvaus centro modeliavimas naudojant molekulių dinamiką

## Modeling of active center of bacteriorhodopsin using quantum molecular dynamics

Ligitas Vinciūnas<sup>1</sup>, Leonas Valkunas<sup>1</sup>, Mindaugas Macernis<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Cheminės fizikos institutas, Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius  
[mindaugas.macernis@ff.vu.lt](mailto:mindaugas.macernis@ff.vu.lt)

Bakteriorodopsinas – tai baltymas, atsakingas už jonų pernešimą per ląstelės membraną. Kad bakteriorodopsinas atliktų jonų pernešimo funkciją, reikalinga šviesos energija. Bakteriorodopsinas atrastas prieš 40 metų, organizme lotynišku pavadinimu *Halobacterium salinarum*. Kadangi protonų pernešimo funkcija visoje gyvojoje gamtoje yra panaši, dėl to bakteriorodopsino tyrinėjimai yra svarbūs. Bakteriorodopsino aktyviajame centre yra retinalis. Retinaliui sugėrus šviesos energiją, jo konfigūracija pasikeičia iš all-trans į 13-cis, 15-syn. Šis konfigūracijos pokytis sudaro sąlygas bakteriorodopsinui pradėti protono pernešimo procesą.[1,2] Po kiek laiko, retinalio konfigūracija sugrįžta į pradinę būseną ir visas protonų pernešimo procesas, gali kartotis iš naujo. Tai vadinama bakteriorodopsino fotociklu (2 pav).

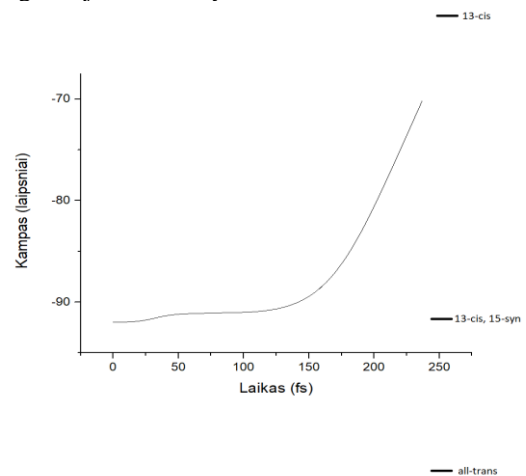


1 pav. Bakteriorodopsino fotociklas

Žinoma, kad retinalio 13-cis, 15-syn konfigūracijos trukmė yra nuo ps iki  $\mu$ s eilės [3], tačiau molekulių dinamikos skaičiavimuose gaunama, kad retinalio 13-cis, 15-syn konfigūracijos trukmė yra fs eilės, dėl to šio darbo pagrindinis tikslas yra įvertinti 13-cis, 15-syn retinalio konfigūraciją iki 1 ps. Išanalizavus įvairius metodus taikomus modeliuojant bakteriorodopsiną nuspręsta, kad bakteriorodopsino aktyviajam centrui (retinaliui) modeliuoti naudosisime tankio funkcionalų teorijos skaičiavimo modelį: B3LYP funkcionalą su cc-pVDZ bazinėmis funkcijomis, o stabilių bakteriorodopsino konfigūracijų paieškai naudojome *ab-initio* molekulių dinamiką, įdiegta Gaussian 16 pakete.

Atlikus retinalio struktūros optimizaciją (vakuume ir iš bakteriorodopsino baltymo iškirptų molekulių lauke)

pastebėjome, kad retinalio formai didelę įtaką daro jo aplinka. Retinalio struktūros optimizacijos metu, dėl netinkamos molekulių aplinkos, retinalis gali užimti ne tą konfigūraciją kuri tikėtina pagal žinomus kristolografinius duomenis. Todėl buvo atliktas tyrimas molekulių atrinkimas iš baltymo yra ypač svarbus tirinėjant retinalio 13-cis, 15-syn konfigūraciją. Retinalio konfigūracija 13-cis, 15-syn egzistuoja sužadintoje būsenoje, todėl su ja buvo atlikti molekulių dinamikos skaičiavimai ties 300 K, 70 K ir 1 K temperatūrose. Skaičiavimo rezultatai rodo, kad retinalio 13-cis, 15-syn konfigūracija vakuume išsilaiko maždaug 30 fs, su papildomomis šalia esančiomis molekulėmis maždaug 130 fs (2 pav.), o temperatūros keitimas retinalio konfigūracijai esminės įtakos nedaro.



2 pav. Retinalio konfigūracijos kitimas molekulių dinamikos metu, kai T = 1 K.

Darbe buvo naudotas Vilniaus universiteto Fizikos fakulteto aukšto našumo superkompiuteris „VU HPC“ Saulėtekis.

*Reikšminiai žodžiai: bakteriorodopsinas, retinalis, kvantinė molekulių dinamika..*

### Literatūra

- [1] C. Wickstrand, et al., Bacteriorhodopsin: Would the real structural intermediates please stand up?, *Biochim. Biophys. Acta* (2014), <http://dx.doi.org/10.1016/j.bbagen.2014.05.021>
- [2] B.P. Kietis, M. Macernis, J. Sulskus, L. Valkunas, *Lith. J Phys.* **50**, 4, (2010).
- [3] Ernst OP, Lodowski DT, Elstner M, Hegemann P, Brown LS, Kandori H. Microbial and animal rhodopsins: structures, functions, and molecular mechanisms. *Chem Rev.* 2014;114(1):126-163. doi:10.1021/cr4003769