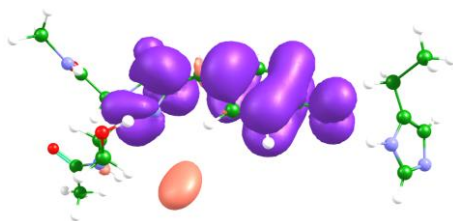


ЭЛЕКТРОНОДОНОРНЫЕ СВОЙСТВА ЗЕЛЕННОГО ФЛУОРЕСЦЕНТНОГО БЕЛКА

М. Г. Хренова, Б. Л. Григоренко, А. В. Немухин

Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова

Зеленый флуоресцентный белок (GFP) является эффективным биомаркером в живых системах. Он применяется для решения биохимических и медицинских задач на молекулярном уровне. Было показано, что зеленый флуоресцентный белок также может проявлять фотоиндуцированные электронодонорные свойства [А.М. Bogdanov *et al.* Nature Chemical Biology, 2009, 5, 459]. При облучении раствора, содержащего GFP и окислитель, происходит восстановление молекул окислителя и изменение спектральных характеристик GFP. Теоретическое описание таких процессов требует новых подходов, поскольку невозможно использовать описание в терминах потенциалов ионизации белковых систем.



Пример состояния с переносом заряда с молекулы хромофора на окружение

Для отрицательно заряженной хромофорной группы зеленого флуоресцентного белка (т.е. анионной формы) могут проявляться электронные состояния с переносом заряда с хромофора на белковую матрицу. Эти состояния аналогичны состояниям с переносом заряда на растворитель для водных растворов отрицательно заряженных ионов, и их реализация энергетически менее затратна, чем ионизация молекулы.

Мы исследовали модельные системы, состоящие из хромофора и ближайших аминокислотных остатков методами квантовой химии. Было показано, что состояния с переносом заряда реализуются в подобной системе, и энергия таких переходов гораздо меньше, чем энергия ионизации. При моделировании использовались методы конфигурационного взаимодействия первого порядка (CIS), первого и второго порядков (CISD), а также учитывались поправки, полученные по теории возмущений (SOS-CIS(D)).

Мы исследовали модельные системы, состоящие из хромофора и ближайших аминокислотных остатков методами квантовой химии. Было показано, что состояния с переносом заряда реализуются в подобной системе, и энергия таких переходов гораздо меньше, чем энергия ионизации. При моделировании использовались методы конфигурационного взаимодействия первого порядка (CIS), первого и второго порядков (CISD), а также учитывались поправки, полученные по теории возмущений (SOS-CIS(D)).

Работы по данной тематике поддержаны грантом Президента РФ МК-64815.2010.4. и грантом РФФИ 10-03-00085.