

Аминокислотный состав сайтов связывания хлора белками *Mycobacterium tuberculosis* и *Staphylococcus aureus*

Бондарь Юлия Андреевна, Ясевич Екатерина Геннадьевна

Белорусский государственный медицинский университет, Минск

Научный(-е) руководитель(-и) – кандидат биологических наук, доцент Хрусталева

Владислав Викторович, Побойнев Виктор Витольдович *Белорусский государственный медицинский университет, Минск*

Введение

Аминокислотный состав белков зависит от GC-насыщенности кодирующих их участков ДНК. В геномах бактерий GC-насыщенность генов является относительно постоянной величиной. В геномах эукариот существуют более или менее GC-насыщенные участки. Нередко разные экзоны одного и того же гена демонстрируют резкий контраст по GC-насыщенности. По этой причине исследования особенностей связывания лигандов белками необходимо проводить на выборках белков GC-богатых и GC-бедных бактерий.

Цель исследования

Выявить наиболее часто встречающиеся аминокислотные остатки, входящие в состав сайтов связывания хлора белками *Mycobacterium tuberculosis* и *Staphylococcus aureus*.

Материалы и методы

Из банка данных 3D структур белков (PDB: Protein Data Bank) была получена информация о структуре белков *Mycobacterium tuberculosis* и *Staphylococcus aureus*, содержащих хлор (182 и 164 белка соответственно). После этого выборка была очищена от гомологичных белков с помощью алгоритма Decrease Redundancy. Финальные выборки включают 54 и 76 белков, соответственно. С помощью MS Excel проанализирован аминокислотный состав данных белков и определено процентное соотношение аминокислотных остатков, связывающих ионы хлора, согласно результатам расчёта межатомных расстояний. Аминокислотные остатки, расположенные на расстоянии до 5 Ангстрем от хлорид-иона, включались в состав связывателей. Достоверность различий определяли с помощью t-теста для относительных величин.

Результаты

Единственным аминокислотным остатком, который достоверно чаще встречается среди связывателей хлорид-ионов как в белках *Mycobacterium tuberculosis*, так и в белках *Staphylococcus aureus*, является аргинин. Конкретные частоты встречаемости Arg среди связывателей Cl⁻ и в среднем в белках соответственно равны: 13,56% и 7,25% (P меньше 0,05); 8,78% и 3,68% (P меньше 0,05). Достоверно недораспределены вокруг хлорид-ионов в обеих выборках гидрофобные остатки валина и изолейцина, а также отрицательно заряженные остатки глутаминовой кислоты. Интересно отметить, что в белках *Mycobacterium tuberculosis* остатки аспарагиновой кислоты достоверно недораспределены вокруг ионов Cl⁻, а остатки аспарагина – перераспределены. В белках *Staphylococcus aureus* вокруг хлорид-ионов недораспределены остатки аланина и метионина, но перераспределены ароматические остатки триптофана и гистидина. Важно подчеркнуть, что остатки лизина встречаются в сайтах связывания хлорид-ионов с такой же частотой, как и в среднем в белках. Вполне вероятно, что при физиологическом значении pH боковая цепь аргинина чаще существует в протонированном состоянии (следовательно, имеет положительный заряд), чем боковая цепь лизина. Действительно, значение pK_b для боковой цепи аргинина равно 12,5, а для боковой цепи лизина – 10,8.

Выводы

Наиболее часто встречающимся аминокислотным остатком, связывающим ионы Cl⁻, является аргинин, что можно объяснить электростатическим взаимодействием между положительно заряженной гуанидиновой группой боковой цепи аргинина и отрицательно заряженным хлорид-ионом.