

Бондарь Ю. А., Ясевич Е. Г.

САЙТЫ СВЯЗЫВАНИЯ ИОНОВ ХЛОРА БАКТЕРИАЛЬНЫМИ БЕЛКАМИ
*Научные руководители канд. биол. наук, доц. Хрусталева В. В., магистр. мед. наук,
ассист. Побойнев В. В.*

Кафедра общей химии

Белорусский государственный медицинский университет, г. Минск

Актуальность. Хлор является одним из самых распространенных элементов в живых организмах и относится к важнейшим биогенным элементам. В организме человека ионы хлора выполняют ряд важных функций: регулирует осмотическое давление и водно-солевой обмен, создают оптимальные условия для действия ферментов желудочного сока, а также является одним из участников трансэпителиального транспорта ионов.

Цель: выявить наиболее часто встречающиеся аминокислотные остатки, входящие в состав сайтов связывания хлора белками *Mycobacterium tuberculosis* и *Staphylococcus aureus*, а также определить тип связи между ионом хлора и атомами аминокислотных остатков.

Материалы и методы. Получение информации о структуре белков *Mycobacterium tuberculosis* и *Staphylococcus aureus*, содержащих хлорид-ионы, из банка данных (PDB: Protein Data Bank). Очистка выборки от гомологичных белков с помощью алгоритма Decrease Redundancy. Анализ аминокислотного состава данных белков и определение процентного соотношения аминокислотных остатков, связывающих ионы хлора, используя MS Excel. Протонирование структур белков с помощью алгоритма HADD. Расчёт межатомных расстояний и углов с помощью оригинального алгоритма. Определение достоверности различий на основании t-теста для относительных величин.

Результаты и их обсуждения. Остатки аргинина и аспарагина достоверно чаще связывают ионы Cl⁻ функциональными группами боковых цепей, а остатки аспарагиновой и глутаминовой кислот достоверно чаще связывают ионы Cl⁻ за счёт атомов пептидных связей. Взаимодействие между хлоридом и аминокислотным остатком аргинина в подавляющем большинстве случаев является ионным.

Выводы. Аминокислотные остатки с небольшими боковыми цепями (Gly, Ala, Cys, Ser, Thr) чаще способны к связыванию хлорид-ионов атомами из пептидной связи, в отличие от аминокислотных остатков с объёмной боковой цепью (Pro, Leu, Val, Ile, Met, His, Phe, Tyr, Trp, Lys, Arg), которые практически не доступны для взаимодействия с хлорид-ионами. Положительно заряженные остатки аргинина и лизина чаще взаимодействуют с хлоридом с помощью функциональных групп, а отрицательно заряженные боковые цепи аспарагиновой и глутаминовой кислот – пептидных связей. Аспарагин предпочтительно взаимодействует с хлорид-ионом амидной группой, а глутамин – с одинаковой вероятностью приближается к этим анионам всеми своими атомами.