

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. Хлорид-ион является важнейшим анионом во всех живых организмах. У растений хлор активирует окислительное фосфорилирование и участвует в процессе фотосинтеза. В организме животных и человека влияет на активность Na^+/K^+ -АТФ-азы, участвует в поддержании рН клеток и осмотического давления, а также во многих других жизненно важных метаболических процессах.

Цель: выявить наиболее часто встречающиеся аминокислотные остатки, входящие в состав сайтов связывания хлора белками *Escherichia coli*, а также линейные мотивы вторичной структуры, в которых эти остатки находятся. Сравнить полученные данные с аналогичными имеющимися по белкам *Mycobacterium tuberculosis* и *Staphylococcus aureus*.

Материалы и методы. Получение информации о структуре белков *Escherichia coli*, содержащих хлорид-ионы, из банка данных (PDB: Protein Data Bank). Очистка выборки от гомологичных белков с помощью алгоритма Decrease Redundancy. Определение вторичной структуры белков с помощью алгоритма DSSP. Протонирование структур белков с помощью алгоритма HADD. Анализ аминокислотного состава и линейных мотивов вторичной структуры данных белков и определение процентного соотношения аминокислотных остатков, связывающих ионы хлора, используя алгоритм 5AI, который находит остатки, контактирующие с ионом на расстоянии до 5 Ангстрем. Определение достоверности различий на основании t-теста для относительных величин.

Результаты и их обсуждение. Несколько аминокислотных остатков встречаются в сайтах связывания хлорид-ионов достоверно чаще, чем в участках белков, не взаимодействующих с этими ионами: аргинин, лизин, серин, аспарагин, глутамин, гистидин, фенилаланин, тирозин, триптофан. Остатки перечислены в порядке убывания их частоты встречаемости в сайтах связывания хлорид-ионов. Если же перечислить их в порядке убывания степени перераспределённости, то ряд будет выглядеть иначе: аргинин, гистидин, триптофан, аспарагин, глутамин, лизин, фенилаланин, тирозин. При дальнейшем анализе было выявлено, что аминокислотные остатки из мотивов β -тяж-петля- α -спираль, β -тяж-петля- β -тяж и α -спираль-петля- α -спираль связывают хлорид-ионы достоверно чаще, чем должны были бы, в изученных 184 белках *Escherichia coli*. Наиболее перераспределённым мотивом при этом является β -тяж-петля- α -спираль, а наиболее часто встречающимся – β -тяж-петля- β -тяж.

Выводы. Аргинин является наиболее частым аминокислотным остатком, с которым связывается хлорид как в белках *Escherichia coli*, так и в белках *Mycobacterium tuberculosis* и *Staphylococcus aureus*. Достоверно недораспределены вокруг хлорид-ионов гидрофобные остатки лейцина, валина и аланина. Остатки гистидина достоверно перераспределены среди связывателей хлорид-ионов в белках *Escherichia coli*, но не в белках *Mycobacterium tuberculosis* и *Staphylococcus aureus*. Если мотив β -тяж-петля- α -спираль является наиболее часто встречающимся при связывании хлоридов в белках *Mycobacterium tuberculosis* и *Staphylococcus aureus*, то в белках *Escherichia coli*, помимо мотива β -тяж-петля- α -спираль, достоверно чаще встречается мотив β -тяж-петля- β -тяж.