

Гуцу А. И.

РАСПРЕДЕЛЕНИЕ АМИНОКИСЛОТНЫХ ОСТАТКОВ ПО ЭЛЕМЕНТАМ ВТОРИЧНОЙ СТРУКТУРЫ ПРИ НЕЙТРАЛЬНОМ УРОВНЕ КИСЛОТНОСТИ

Научные руководители: ассист. Побойнев В. В.,

канд. биол. наук, доц. Хрусталёв В. В.

Кафедра общей химии

Белорусский государственный медицинский университет, г. Минск

Актуальность. Структурные переходы лежат в основе многочисленных физиологических процессов в организме человека. Кроме того, большое количество заболеваний связано с переходом одних элементов вторичной структуры в других. На возможность осуществления структурных переходов влияют различные факторы, в том числе изменение уровня кислотности биологических жидкостей и связывание с лигандами различной природы.

Цель: распределить аминокислотные остатки по их частотам встречаемости в альфа-спиралях, бета-тяжах и петлях при $pH = 7,4$.

Материалы и методы. В данной работе использовалась аминокислотная последовательность негомологичных белков при $pH = 7,4$. Были сформированы две группы белков: содержащие и не содержащие лиганды в своей структуре. Информация о аминокислотной последовательности белков и о их третичной структуре взята из PDB (www.rcsb.org). Максимальный процент сходства белков в каждой группе не превышал 25%. Гомологичность определяли с помощью алгоритма Decrease redundancy (www.web.expasy.org/decrease_redundancy/). Границы элементов вторичной структуры внутри каждого белка определены при помощи алгоритма DSSP (<https://www3.cmbi.umcn.nl/xssp/>). Статистическую обработку результатов проводили при помощи t-теста для относительных величин.

Результаты и их обсуждение. Были определены частоты встречаемости каждого аминокислотного остатка в белках при $pH = 7,4$ не содержащих лиганды различной природы. В результате сравнения частот встречаемости каждого аминокислотного остатка в альфа-спиралях, бета-тяжах и койле определено, что наибольшие частоты встречаемости в альфа-спиралях характерны для аланина ($9,19 \pm 0,53\%$), аргинина ($5,27 \pm 0,41\%$), глутаминовой кислоты ($9,56 \pm 0,54\%$), глутамина ($5,68 \pm 0,43\%$), лейцина ($13,55 \pm 0,63\%$), метионина ($2,43 \pm 0,28\%$), лизина ($7,67 \pm 0,49\%$). Наибольшие частоты встречаемости в бета-тяжах характерны для валина ($12,56 \pm 0,83\%$), триптофана ($2,03 \pm 0,36\%$), цистеина ($3,87 \pm 0,49\%$), фенилаланина ($6,66 \pm 0,63\%$), тирозина ($4,82 \pm 0,54\%$) и изолейцина ($8,44 \pm 0,70\%$). Наибольшие частоты встречаемости в койле характерны для глицина ($9,54 \pm 0,47\%$), пролина ($9,34 \pm 0,46\%$), серина ($7,83 \pm 0,43\%$), аспарагиновой кислоты ($7,17 \pm 0,41\%$), гистидина ($2,45 \pm 0,25\%$), аспарагина ($6,00 \pm 0,38\%$). Для треонина нет достоверной разности между частотами встречаемости в бета-тяжах и койле. Также были определены частоты встречаемости каждого аминокислотного остатка в белках при $pH = 7,4$, содержащих лиганды различной природы. Распределение аминокислотных остатков по элементам вторичной структуры имеет те же тренды, что и белках, не содержащих лиганды. Имеются и некоторые отличия: треонин имеет достоверно большую частоту встречаемости в бета-тяжах, чем в койле; тирозин является бета-структурной аминокислотой в обеих группах, однако в белках без лигандов его частота встречаемости выше в альфа-спиралях, чем в койле, а в белках с лигандами – наоборот.

Выводы. В результате проведенной работы установлено, что альфа-спиральными аминокислотными остатками в белках при $pH = 7,4$ являются аланин, аргинин, глутаминовая кислота, глутамин, лейцин, метионин и лизин. Бета-структурными – валин, триптофан, цистеин, фенилаланин, тирозин, изолейцин. Глицин, пролин, серин, аспарагиновая кислота, гистидин и аспарагин чаще встречаются в койле.