

Романенко А.С., Дикун Д.А.

**АМИНОКИСЛОТНЫЕ ОСТАТКИ, СПОСОБНЫЕ К ПЕРЕХОДУ
В НЕСТРУКТУРИРОВАННОЕ СОСТОЯНИЕ В САЙТАХ СВЯЗЫВАНИЯ
КАТИОНОВ КАЛЬЦИЯ С БЕЛКАМИ**

*Научные руководители: д-р биол. наук, доц. Хрусталёв В.В.,
магистр мед. наук, ассист. Побойнев В.В.*

Кафедра общей химии

Белорусский государственный медицинский университет, г. Минск

Актуальность. Белки играют определяющую роль в жизнедеятельности всех живых организмов. На структуру, свойства и биохимическую активность полипептидов, помимо нуклеотидной последовательности ДНК, оказывают влияние лиганды, связанные с их аминокислотными остатками. Говоря о ионах в роли лигандов в сайтах связывания с полипептидами, полезно выявить, с какими аминокислотными остатками чаще всего связываются определенные ионы и какое влияние данные ионы оказывают на структуру полипептида, так как эти сведения могут оказаться ценными для различных областей медицинской науки.

Цель: выявить наиболее часто встречающиеся аминокислотные остатки, входящие в состав сайтов связывания ионов кальция с белками и определить влияние катиона кальция в роли лиганда на структуру полипептидной цепи.

Материалы и методы. В ходе работы нами были использованы: база данных PDB (Protein Data Bank), веб-сервис PLIP (Protein-Ligand Interaction Profiler), алгоритм PentUnFOLD и MS Excel. Из базы данных PDB были получены трёхмерные структуры белков, из которых извлекали данные о вторичной структуре и аминокислотных последовательностях полипептидных цепей, затем при помощи алгоритма PentUnFOLD была предсказана способность аминокислотных остатков переходить в неструктурированное состояние. Дальнейший статистический анализ проводили с помощью MS Excel.

Результаты и их обсуждение. В ходе исследования было проанализировано: 196 полипептидных цепей, 393 координационные сферы для катионов кальция. Было обнаружено, что в сайтах связывания с катионом кальция достоверно более часто встречаются аминокислотные остатки Asp и Glu. Было обнаружено, что аминокислотные остатки, которые связываются с катионами кальция, достоверно чаще предсказываются как способные к переходу в неструктурированное состояние (disorder), но при этом они чаще находятся в элементах вторичной структуры, не склонных к переходу в петлю (random coil).

Интересно отметить, что описанные выше закономерности не выполняются для остатков Asp и Glu, но полностью выполняются для остатков Ser, связывающих катионы кальция в 79% случаях совместно с остатками Asp.

Выводы: остатки Asp и Glu в сайтах связывания катионов кальция белками преимущественно находятся во фрагментах полипептидных цепей, не склонных к переходу в неструктурированное состояние, в отличие от других остатков, формирующих вместе с ними координационные сферы, в частности, от остатков Ser.