

Касько Т. Е., Першай Д. А.

АНАЛИЗ PDB ФАЙЛОВ ПРИ ПОМОЩИ ПРОГРАММНОГО АЛГОРИТМА ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ ДАННЫХ О САЙТАХ СВЯЗЫВАНИЯ ЛИГАНДОВ

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

Кафедра общей химии

Белорусский государственный медицинский университет, г. Минск

Актуальность. Формат Protein Data Bank (PDB) является стандартом для файлов, содержащих атомные координаты. Он используется для структур в Protein Data Bank и читается многими программами. PDB-файлы используются для хранения данных, об аминокислотном составе белков, 3D-структуре белка (с использованием координат), о сайтах связывания ионов с данным белком и расположении этих ионов в трёхмерном пространстве (с использованием координат). Полная спецификация файла PDB содержит большое количество информации, включая авторов, литературные ссылки и метод определения структуры. Учитывая размер, объёмное содержимое файлов и потребность в анализе большого количества файлов, для изучения взаимодействия различных ионов с белками, возникает необходимость оптимизации процесса анализа PDB файлов и уменьшения затрачиваемого на это времени.

Цель: улучшить и ускорить процесс анализа файлов, формата PDB, оптимизировать организацию работы и упростить проведение обработки информации, которая была выделена из выбранных файлов для дальнейшего использования полученных данных.

Материал и методы. Для начала работы необходимо скачать файл формата PDB, открыть его как текстовый документ, полностью скопировать содержимое и вставить в поле ввода. Алгоритм находит необходимый ион, считывает его координаты, а затем измеряет расстояние между ионом и каждым из атомов в структуре PDB файла. После нахождения наименьшего расстояния, на выходе мы получаем аминокислоту, с которой наиболее вероятно связан лиганд и расстояние до атома, с которым предположительно образуется связь.

Результаты и их обсуждение. На основании полученного анализа составлен алгоритм для автоматического вычисления сайтов связывания, определения связывающих атомов и аминокислот в выбранной структуре. Также составлен алгоритм для количественного подсчёта остатков аминокислот, входящих в структуру сайтов связывания.

Выводы. Обработка информации, полученной из PDB – длительный и трудоёмкий процесс, необходимый для построения детального представления о сайтах связывания ионов с выборкой белков. Этот метод используется обширным кругом исследователей для дальнейшего анализа полученных данных и формулирования соответствующих выводов. Наша работа способствует оптимизации и облегчению проводимых в этой области исследований.