

*Карчевская К. И.*

## АМИНОКИСЛОТНЫЙ СОСТАВ САЙТОВ СВЯЗЫВАНИЯ МАГНИЯ БЕЛКАМИ ЧЕЛОВЕКА

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

*Кафедра общей химии*

*Белорусский государственный медицинский университет, г. Минск*

**Актуальность.** Магний – это жизненно важный микроэлемент, металл из ПА подгруппы, необходимый для осуществления основных этапов метаболизма. Магний стабилизирует АТФ, делая возможными репликацию, транскрипцию и репарацию ДНК и РНК, активирует более 300 различных ферментных систем, участвует в работе антиоксидантной системы организма. Определение аминокислотного состава сайтов связывания магния белками человека может помочь в создании методов для выявления патологий, связанных с транспортом ионов магния в клетку, нарушением синтеза аминокислот, расстройством протекания ассимиляционных процессов в организме. Полученные знания впоследствии можно будет использовать для изучения патогенеза летальных инфекций, хронических заболеваний и рака.

**Цель:** выявить наиболее часто встречающиеся аминокислотные остатки, входящие в состав сайтов связывания магния белками человека.

**Материалы и методы.** В данной работе было проанализировано 96 белков человека и животных из базы данных Protein Data Bank, процент сходства между их аминокислотными последовательностями не превышает 25%. Между катионами магния и аминокислотными остатками обнаружено 666 контактов с использованием расчётного алгоритма 5AI, в то время как программа Protein-Ligand Interaction Profiler (PLIP) выявила только 182 контакта. Аминокислотный состав внутренних сфер (определяемых как по алгоритму PLIP, так и по алгоритму 5AI) был сравнён с аминокислотным составом внешних сфер (определяемых только по алгоритму 5AI), а затем – с общим аминокислотным составом белков с помощью t-теста для относительных величин.

**Результаты и их обсуждение.** Было выявлено, что четыре аминокислотных остатка достоверно чаще образуют координационные связи с магнием (до 3А), чем этого можно ожидать, исходя из аминокислотного состава белков: аспарагиновая кислота (43,95%±3,68% координационных связей), треонин (11,5%±2,37%), глутаминовая кислота (12,09±2,42%), гистидин (7,69±1,98%). Преимущественно полярные, а не координационные связи (от 3 до 5А) с катионами магния образуют глицин (9,7%±1,35% связей) и аспарагин (8,26%±1,25%). Такие связи часто образуют и остатки аспарагиновой кислоты (16,53%±1,69%), хотя для них более характерны координационные связи с  $Mg^{2+}$ .

Такие аминокислотные остатки, как аспарагиновая кислота, глутаминовая кислота, серин, треонин, глутамин и аспарагин достоверно чаще образуют с катионами магния связи за счёт функциональных групп боковых цепей, а не за счёт атомов кислорода и азота из основной цепи. Атомы кислорода и азота остатков глицина и изолейцина достоверно чаще приближены к катионам магния, чем атомы углерода.

**Выводы.** Наиболее часто встречающимися аминокислотными остатками, связывающими ионы  $Mg^{2+}$ , являются остатки аспарагиновой и глутаминовой кислот, треонина, аспарагина, гистидина и глицина. Для первых четырёх преимущественное связывание происходит за счёт контакта иона магния с боковыми функциональными группами остатков аминокислот, а для последних двух – за счёт атомов основной цепи.