

**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  $\text{Na}^+/\text{K}^+$ -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  $\beta$ -тяж-петля- $\alpha$ -спираль,  $\beta$ -тяж-петля- $\beta$ -тяж и  $\alpha$ -спираль-петля- $\alpha$ -спираль связывают хлорид-ионы достоверно чаще, чем должны были бы, в изученных 184 белках *Escherichia coli*. Наиболее перераспределённым мотивом при этом является  $\beta$ -тяж-петля- $\alpha$ -спираль, а наиболее часто встречающимся –  $\beta$ -тяж-петля- $\beta$ -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  $\beta$ -тяж-петля- $\alpha$ -спираль является наиболее часто встречающимся при связывании хлоридов в белках *Mycobacterium tuberculosis* и *Staphylococcus aureus*, то в белках *Escherichia coli*, помимо мотива  $\beta$ -тяж-петля- $\alpha$ -спираль, достоверно чаще встречается мотив  $\beta$ -тяж-петля- $\beta$ -тяж.