

*Коротких Т. О., Петлёва У. В.*  
**ОПРЕДЕЛЕНИЕ САЙТОВ СВЯЗЫВАНИЯ КАТИОНОВ КАЛЬЦИЯ**  
*Научные руководители: ассист. Побойнев В. В.,  
канд. биол. наук, доц. Хрусталёв В. В.*  
*Кафедра общей химии*  
*Белорусский государственный медицинский университет, г. Минск*

**Актуальность.** Кальций является одним из наиболее распространённых макроэлемент в организме человека и животных. Ионы кальция участвуют в процессах свёртывания крови, а также служат одним из универсальных вторичных посредников внутри клеток и регулируют различные процессы: сокращение мышц, высвобождением нейромедиаторов и активацию ферментов. С катионами кальция за сайты связывания на белках могут конкурировать и другие близкородственные катионы, в частности катионы  $Mg^{2+}$ . Поэтому, выявление особенностей сайтов связывания катионов  $Ca^{2+}$  является актуальной задачей.

**Цель:** определение сайтов связывания катионов кальция негомологичными белками.

**Материалы и методы.** В данной работе использовалась аминокислотная последовательность 100 негомологичных белков, содержащих в своей структуре катионы  $Ca^{2+}$ . Информация о аминокислотной последовательности белков и о их третичной структуре взята из PDB ([www.rcsb.org](http://www.rcsb.org)). В состав выборки вошли только цепи белков, содержащие в своём составе катионы кальция, которые связаны именно с белком, а не с другими лигандами. Максимальный процент сходства белков в группе не превышал 25%. Гомологичность определяли с помощью алгоритма Decrease redundancy ([www.web.expasy.org/decrease\\_redundancy/](http://www.web.expasy.org/decrease_redundancy/)). Границы элементов вторичной структуры внутри каждого белка определены при помощи алгоритма DSSP (<https://www3.cmbi.umcn.nl/xssp/>). Аминокислотные остатки, связывающие катионы  $Ca^{2+}$  определяли с помощью программы PLIP (<https://plip-tool.biotec.tu-dresden.de/plip-web/plip/index>). Статистическую обработку результатов проводили при помощи t-теста для относительных величин.

**Результаты и их обсуждение.** Были проанализированы частоты встречаемости каждого аминокислотного остатка в белках, связывающих катионы  $Ca^{2+}$  и частоты встречаемости аминокислотных остатков в сайтах связывания катионов кальция. Определена доля каждого аминокислотного остатка из сайтов связывания катиона относительно их встречаемости в белках, связывающих катионы кальция. В изученных 100 сайтах связывания катионов кальция в координации катиона принимают участие 317 аминокислотных остатка. Большая доля из которых приходится на аспарагиновую кислоту (141 аминокислотных остатков или 44,48%), на глутаминовую кислоту (55 аминокислотных остатков или 17,35%), на глицин (26 аминокислотных остатков или 8,20%) и на треонин (22 аминокислотных остатков или 6,94%). При этом частоты встречаемости данных аминокислотных остатков в белках равны 6,70%, 5,93%, 7,59% и 6,07% соответственно.

**Выводы.** Главными связывателями катионов  $Ca^{2+}$  на расстоянии до 3 ангстрем являются аспарагиновая и глутаминовая кислоты, глицин и треонин.