

## АЛГОРИТМ PENTA FOLD 3.1 ДЛЯ АНАЛИЗА СТАБИЛЬНОСТИ ЭЛЕМЕНТОВ ВТОРИЧНОЙ СТРУКТУРЫ БЕЛКОВ

Хрусталёв В.В., Хрусталёва О.В., Тарасик М.С., Касько Т.Е., Сперанская Е.Ч.,  
Петрушенко Л.Г., Ачинович О.В.

*УО «Белорусский государственный медицинский университет», Минск, Беларусь*

[vykhrustalev@mail.ru](mailto:vykhrustalev@mail.ru)

Важнейшим этапом в дизайне нового вакцинного антигена является анализ элементов его вторичной структуры на предмет устойчивости. В том случае, если в качестве вакцинного антигена выступает относительно короткий пептид, существует довольно высокая вероятность того, что его вторичная структура будет отличаться от вторичной структуры соответствующего ему фрагмента полноразмерного белка. Короткие пептиды зачастую образуют олигомеры в водных растворах, в которых отдельные полипептидные цепи формируют друг с другом межмолекулярную бета-структуру [1]. Длинные альфа-спиральные фрагменты могут полностью или частично превращаться в петли [1]. Алгоритм PentaFOLD 3.0 был создан для поиска элементов вторичной структуры, способных формироваться самопроизвольно в водном растворе, без влияния других фрагментов того же самого или других белков [2]. При этом в качестве исходных данных он использовал как координаты атомов из файла PDB, так и описание границ элементов вторичной структуры с помощью метода DSSP [3]. В связи с санкциями сервер, с помощью которого можно было применить метод DSSP, стал недоступен для отечественных исследователей. Возникла необходимость создания собственного метода описания элементов вторичной структуры. Такой метод (под названием USSA [4]) был разработан и размещён в открытом доступе на сервере Белорусского государственного медицинского университета (<http://pent-unfold.bsmu.by/ussa>). В работу USSA добавили опцию определения положения атомов водорода на кислороде и азоте из главной цепи с помощью искусственного интеллекта, который был натренирован на файлах PDB, полученных путём анализа спектров ЯМР. Поскольку формат аутпута DSSP отличается от такового для USSA, возникла необходимость адаптировать PentaFOLD под новый формат данных о вторичной структуре. Результатом такой адаптации и стала новая версия (3.1) ранее зарекомендовавшего себя алгоритма. Важно отметить, что описание вторичной структуры с помощью USSA несколько отличается от такового с помощью DSSP [4], чем и обусловлены различия в результатах работы PentaFOLD 3.0 и PentaFOLD 3.1.

### Литература

1. Conjugation with the Carrier Helped to Reveal acidification-Induced Structural Shift in the Peptide from Phospholipase Domain of Parvovirus B19 / V.V. Khrustalev [et al.] // Protein J. – 2024. – Vol.43. – P. 805-818.
2. Khrustalev, V.V. The PentaFOLD 3.0 Algorithm for the Selection of Stable Elements of Secondary Structure to be Included in Vaccine Peptides / V.V. Khrustalev // Protein Pept. Lett. – 2021. – Vol. 28. – P.573-588.
3. Kabsch, W. Dictionary of protein secondary structure: pattern recognition of hydrogen-bonded and geometrical features / W. Kabsch, C. Sander // Biopolymers. – 1983. – Vol. 22. – P. 2577–2637.
4. Хрусталёв, В.В. USSA – метод описания вторичной структуры белков / В.В. Хрусталёв, Т.Е. Касько, В.В. Побойнев, Т.А. Хрусталёва // Биохимия и молекулярная биология. – 2022. – Т. 1. – № 1. – С. 8 – 14.



Институт биофизики  
и клеточной инженерии  
НАН Беларуси



НАЦИОНАЛЬНАЯ АКАДЕМИЯ НАУК БЕЛАРУСИ  
ИНСТИТУТ БИОФИЗИКИ И КЛЕТОЧНОЙ ИНЖЕНЕРИИ  
НАН БЕЛАРУСИ

**СОВРЕМЕННЫЕ ПРОБЛЕМЫ  
КЛЕТОЧНОЙ ИНЖЕНЕРИИ,  
ИММУНОЛОГИИ И АЛЛЕРГОЛОГИИ**

**Тезисы докладов  
IV Международной научной конференции**

**Республика Беларусь, Минск, 21–22 ноября 2024 г.**

Научное электронное издание

Минск  
«Колорград»  
2024