

Побойнев В. В.

САЙТЫ СВЯЗЫВАНИЯ АНИОНОВ И КАТИОНОВ В БОЛЬШОМ ПРИОННОМ БЕЛКЕ ЧЕЛОВЕКА

*Научные руководители д-р биол. наук, проф. Барковский Е. В.,
канд. биол. наук, ассист. Хрусталёв В. В.*

Кафедра общей химии

Белорусский государственный медицинский университет, г. Минск

Актуальность. Механизмы образования бета-амилоида при прионных заболеваниях до сих пор не установлены. На различных белках можно обнаружить как специфические сайты связывания для определенных катионов или анионов, так и неспецифические. Специфические для данного вида ионов сайты связывания и прилегающие к ним области отличаются особенностями аминокислотного состава и вторичной структуры.

Цель: установить сайты связывания анионов и катионов в большом прионном белке человека.

Материал и методы. В данной работе была использована третичная структура большого прионного белка человека. Идентификатор этого белка в Protein Data Bank – 1HJM (www.pdb.org). Для определения сайтов связывания анионов и катионов был использован web server BION (Binding IOns Nonspecifically). Для вычисления расстояний между ионом (гетероатомом) и атомами аминокислот использовался оригинальный алгоритм BION distances.

Результаты. Выявлены все сайты связывания анионов и катионов в большом прионном белке человека. Рассчитаны расстояния от каждого гетероатома до ближайших атомов аминокислот большого прионного белка человека.

Выводы:

1. Наибольшее скопление сайтов связывания катионов обнаружено в начале третьей альфа-спирали большого прионного белка человека.
2. Установлено, что общим наиболее вероятным сайтом связывания для катионов Be^{2+} , Mn^{2+} , Mg^{2+} , Zn^{2+} , Fe^{2+} , Na^{+} и K^{+} является остаток Glu207, находящийся на N-конце третьей альфа-спирали большого прионного белка человека.
3. Сайты связывания катионов присутствуют и в области первой альфа-спирали большого прионного белка человека (Asp147, Asp144, Glu146), которая принимает участие в образовании димеров.