

Осипова Е.В.

**БАЗЫ ДАННЫХ БЕЛОК-ЛИГАНДНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ
КАК ИНСТРУМЕНТ БИОИНФОРМАТИЧЕСКОГО АНАЛИЗА**

Научный руководитель: канд. биол. наук, доц. Сутько И.П.

Кафедра биохимии

Гродненский государственный университет имени Янки Купалы, г. Гродно

Белок-лигандные взаимодействия представляют собой одну из важнейших основ функционирования живых систем. Они лежат в основе практически всех жизненно важных процессов, протекающих в организмах: от ферментативного катализа и передачи сигнала до регуляции экспрессии генов и иммунного ответа.

Основываясь на пространственных структурах взаимодействующих молекул и их физических свойствах, можно предсказать места контакта или связывания этих молекул, рассчитать характеристики связывания.

Важным инструментом в исследовании белок-лигандных взаимодействий являются специализированные базы данных, в которых аккумулируются сведения о структуре белков и лигандов, типах их связывания, аффинности взаимодействия, а также экспериментальных и вычислительных характеристиках образующихся комплексов. Использование таких информационных ресурсов позволяет систематизировать большие массивы разнородных данных, проводить их сравнительный анализ и выявлять закономерности, имеющие значение для понимания молекулярных механизмов межмолекулярного взаимодействия. Базы данных белок-лигандных взаимодействий служат основой для виртуального скрининга, молекулярного докинга, поиска новых биологически активных соединений и построения прогностических моделей. Наличие структурированной информации о взаимодействиях белков с лигандами существенно ускоряет проведение научных исследований и способствует повышению точности компьютерного анализа.

Все базы данных белок-лигандных взаимодействий подразделяют на две категории: первичные базы данных, в которых существование белок-лигандных взаимодействий доказано экспериментально (BioGRID, BIND, HPRD, MINT, DIP, IntAct и др.), и базы прогнозируемых взаимодействий (OPHID, STRING, UniHI и др.), созданные главным образом с использованием методов вычислительного моделирования.

BioGRID (Biological General Repository for Interaction Datasets) является одной из крупнейших и наиболее широко используемых баз данных белковых взаимодействий. Она содержит сведения об экспериментально подтвержденных взаимодействиях белков у различных организмов, собранные на основе большого числа научных публикаций. BIND (Biomolecular Interaction Network Database) предназначена для хранения информации о взаимодействиях различных биомолекул и биохимических путях. HPRD (Human Protein Reference Database) представляет собой специализированный ресурс, посвященный белкам человека, и, помимо сведений о взаимодействиях, содержит информацию об их функциях, посттрансляционных модификациях, клеточной локализации и связи с заболеваниями. Базы данных MINT (Molecular Interaction Database) и DIP (Database of Interaction Proteins) в основном содержат информацию об экспериментально подтвержденных взаимодействиях между белками с указанием литературных источников и условий выполнения исследований.

OPHID (Online Predicted Human Interaction Database) создана как ресурс предсказанных взаимодействий между белками человека и объединяет литературные данные из BIND, HPRD и MINT с результатами вычислительного прогнозирования. STRING является одной из наиболее известных современных баз, объединяющих информацию как об экспериментально доказанных, так и вычислительно спрогнозированных взаимодействиях между белками.

Базы данных белок-лигандных взаимодействий выступают неотъемлемой частью современного биоинформатического анализа и играют важную роль в развитии фундаментальных и прикладных исследований.