

ДОСТУПНОСТЬ РАСТВОРИТЕЛЮ ЭЛЕМЕНТОВ ВТОРИЧНОЙ СТРУКТУРЫ БЕЛКОВ

Хрусталёв В.В.¹, Стожаров А.Н.¹, Побойнев В.В.¹, Хрусталёва Т.А.²

¹УО «Белорусский государственный медицинский университет», Минск,
Беларусь

²ГНУ «Институт Физиологии НАН Беларуси», Минск, Беларусь

Доступность растворителю – один из ключевых параметров для оценки иммуногенных свойств белков.

Цель – оценка степени доступности водному окружению аминокислотных остатков, входящих в состав альфа-спиралей, бета-тяжей и неструктурированных участков белков четырёх структурных классов.

Материал: четыре выборки трёхмерных структур негомологичных белков эукариот (по 100 белков в каждой) из Protein Data Bank, соответствующих белкам классов «бета», «альфа», «альфа+бета» и «альфа/бета». Степень доступности сольвенту для каждого аминокислотного остатка оценена с помощью алгоритма ASA-View [1]. Остатки классифицировали на неэкспонированные (степень доступности сольвенту ниже 0,1), частично экспонированные (от 0,1 до 0,5) и экспонированные (>0,5).

Наиболее часто недоступные сольвенту остатки встречаются в бета-тяжах белков класса «альфа/бета» (62,76%), в то время как в бета-тяжах бета-структурных белков таких остатков только 47,91%. В альфа-спиральных белках и белках класса «альфа+бета» этот процент равен 55,96% и 52,91%, соответственно. Для альфа-спиралей процент неэкспонированных остатков в белках классов «бета», «альфа», «альфа+бета» и «альфа/бета» составил, соответственно: 39,58%; 41,79%; 41,44% и 42,52%. Для неструктурированных участков белков – в той же последовательности: 20,73%; 21,83%; 23,97%; 27,04%. В бета-структурных белках содержание аминокислотных остатков, доступных и частично доступных растворителю, достоверно выше, чем в белках других структурных классов, за счёт большей частоты использования в них относительно гидрофильных бета-тяжей. Наименее доступными водному окружению являются аминокислотные остатки белков класса «альфа/бета», расположенные в тех гидрофобных бета-тяжах, которые образуют их ядра.

Библиографические ссылки

1. Ahmad S., Gromiha M.M., Fawareh H., Sarai A. // BMC Bioinformatics. 2004. Vol.5. N.51.