

БЕЛОРУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
БИОЛОГИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ
Кафедра общей экологии и методики преподавания биологии

Аннотация к дипломной работе
«Структурная биоинформатика генных семейств цитохромов P450 тли
***Macrosiphum Albifrons*»**

Степаненко Виктории Борисовны

Научный руководитель Левыкина С.С.

Минск, 2025

РЕФЕРАТ

Дипломная работа 31 страница, 6 рисунков, 5 таблиц, 45 источников литературы.

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: ТЛИ, *MACROSIPHUM ALBIFRONS*, ЦИТОХРОМЫ P450, СТРУКТУРНАЯ БИОИНФОРМАТИКА, МОЛЕКУЛЯРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ.

Объект исследования: генное семейство цитохромов P450 тли *Macrosiphum albifrons*.

Целью дипломной работы является получение научных данных о генах системы детоксикации, в частности цитохромов, у тли *M. albifrons*.

Методы: биоинформатические.

В результате, в геноме *M. albifrons* было найдено 14 генов, относящихся к 4 кладе цитохромов P450, и 23 гена, относящихся к 3 кладе цитохромов P450. Средняя длина гена – 4915 нуклеотидов, среднее число экзонов – 5, средняя длина экзона – 972 нуклеотида, средняя длина интронов – 2307 нуклеотидов.

Наличие дубликаций генов, таких как CYP6DA1, CYP6CY12, CYP6CY16 и CYP6CY35, которые связаны с метаболизмом пиретроидных и органофосфатных инсектицидов, говорит об устойчивости *M. albifrons* к такого рода инсектицидам. Также наличие большего числа дубликаций в семействе CYP6 может свидетельствовать о более активном участии генов данного семейства в процессе детоксикации метаболитов.

Анализ предсказанных структур цитохрома P450, позволил увидеть распределение метрик достоверности (pLDDT, IDDT) и показал выраженную гетерогенность по полипептидной цепи: консервативные домены, такие как сайт связывания гема и участки каталитической активности, характеризуются высокими значениями pLDDT (>90), что свидетельствует об точности их предсказания. В то же время наличие значительно более низкие значения (pLDDT 50–70) демонстрируют наличие мембранных сегментов и областей гибких петель, которые отвечают за регуляцию ферментативной активности и транспорт субстратов.

Результаты исследования могут быть применены в направлениях исследований в области молекулярной экологии, экологической генетике и энтомологии.

РЭФЕРАТ

Дыпломная работа 31 старонка, 6 малюнкаў, 5 табліц, 45 крыніц літаратуры.

КЛЮЧАВЫЯ СЛОВА: ТЛІ, *MACROSIPHUM ALBIFRONS*, ЦЫТАХРОМЫ P450, СТРУКТУРНАЯ БІЯІНФАРМАТЫКА, МАЛЕКУЛЯРНАЕ МАДЭЛЯВАННЕ.

Аб'ект даследавання: геннае сямейства цытахромаў P450 тлі *Macrosiphum albifrons*.

Мэтай дыпломнай працы з'яўляецца атрыманне навуковых дадзеных аб генах сістэмы детоксікацыі, у прыватнасці цытахромаў, у тлі *M. albifrons*.

Метады: біяінфарматычныя.

У выніку, у геноме *M. albifrons* было знойдзена 14 генаў, якія адносяцца да 4 скарбы цытахромаў P450, і 23 гена, якія адносяцца да 3 скарбы цытахромаў P450. Сярэдняя даўжыня гена - 4915 нуклеатыдаў, сярэдні лік экзонаў - 5, сярэдняя даўжыня экзона - 972 нуклеатыдаў, сярэдняя даўжыня інтронаў - 2307 нуклеатыдаў.

Наяўнасць дублікацый генаў, такіх як CYP6DA1, CYP6CY12, CYP6CY16 і CYP6CY35, якія звязаны з метабалізмам пиретроидных і органофосфатных інсектыцыдаў, кажа аб устойлівасці *M. albifrons* да такога роду інсектыцыдаў. Таксама наяўнасць большай колькасці дуплікацый ў сямействе CYP6 можа сведчыць аб больш актыўным удзеле генаў дадзенага сямейства ў працэсе дэтаксікацыі метабалітаў.

Аналіз прадказаных структур цытахромаў P450, дазволіў убачыць размеркаванне метрык дакладнасці (pLDDT, IDDT) і паказаў выяўленую гетэрагеннасць па поліпептыднай ланцугу: кансерватыўныя дамены, такія як сайт звязвання гема і ўчасткі каталітычнай актыўнасці, характарызуюцца высокімі значэннямі pLDDT (> 90). У той жа час наяўнасць значна ніжэйшыя значэнні (pLDDT 50-70) дэманструюць наяўнасць мембранных сегментаў і абласцей гнуткіх завес, якія адказваюць за рэгуляцыю ферментатыўнай актыўнасці і транспарт субстратаў.

Вынікі даследавання могуць быць ужытыя ў напрамках даследаванняў у галіне малекулярнай экалогіі, экалагічнай генетыцы і энтамалогіі.

ABSTRACT

The graduation project includes: 31 pages, 6 figures, 5 tables, 45 sources of literature.

Key words: APHIDS, *MACROSIPHUM ALBIFRONS*, CYTOCHROMES P450, STRUCTURAL BIOINFORMATICS, MOLECULAR MODELING.

Object of study: gene family of cytochromes P450 of aphids *Macrosiphum albifrons*.

The aim of the thesis is to obtain scientific data on genes of detoxification system, in particular cytochromes, in aphid *M. albifrons*.

Methods: bioinformatics.

As a result, 14 genes belonging to cytochrome P450 clade 4 and 23 genes belonging to cytochrome P450 clade 3 were found in the genome of *M. albifrons*. The average gene length was 4915 nucleotides, the average number of exons was 5, the average exon length was 972 nucleotides, and the average intron length was 2307 nucleotides.

The presence of duplications of genes such as CYP6DA1, CYP6CY12, CYP6CY16 and CYP6CY35, which are related to the metabolism of pyrethroid and organophosphate insecticides, indicates the resistance of *M. albifrons* to these kinds of insecticides. Also, the presence of a greater number of duplications in the CYP6 family may indicate a more active participation of genes of this family in the detoxification of metabolites.

Analysis of the predicted structures of cytochrome P450 allowed us to see the distribution of confidence metrics (pLDDT, IDDT) and showed a pronounced heterogeneity along the polypeptide chain: conserved domains, such as the heme binding site and sites of catalytic activity, are characterized by high pLDDT values (>90), which indicates the accuracy of their prediction. At the same time, the presence of much lower values (pLDDT 50-70) demonstrate the presence of membrane segments and flexible loop regions, which are responsible for the regulation of enzymatic activity and substrate transport.

The results of the study can be applied to research directions in molecular ecology, ecological genetics and entomology.