

АНАЛИЗ ВЗАИМНОГО ПРОСТРАНСТВЕННОГО РАСПОЛОЖЕНИЯ АМИНОКИСЛОТ И НУКЛЕОТИДОВ В СТРУКТУРАХ ДНК-БЕЛКОВЫХ КОМПЛЕКСОВ

Анашкина А.А.¹, Кузнецов Е.Н.², Есипова Н.Г.¹, Туманян В.Г.^{1,3}

¹ИМБ РАН, Россия, 119991, Москва, ул.Вавилова, д. 32. Тел.: (499)135-13-92, факс:
(499)135-14-05, E-mail: nastya@imb.ac.ru

²ИПУ РАН, Россия, 117997, Москва, ул. Профсоюзная, д. 65.

³МФТИ, Россия, 141700, Московская область, г. Долгопрудный, Институтский
переулок, 9.

Если предположить существование принципов распознавания белком ДНК, то сформированный комплекс белка со специфическим участком ДНК должен нести «следы» таких принципов, отражающихся в частотах «прямых контактов» между атомами аминокислот белка и атомами нуклеотидов ДНК. В качестве геометрической основы исследования контактов белок-ДНК был выбран метод Вороного-Делоне [1]. Ранее это разбиение использовалось для анализа белок-белковых взаимодействий [2]. Были проанализированы 1937 комплексов белок-ДНК из PDB. Моделирование случайных и неслучайных контактов выявило, что около 35% контактов между аминокислотами белка и нуклеотидами ДНК являются неслучайными. Доля положительно заряженных аминокислотных остатков Arg и Lys в интерфейсах вдвое больше, по сравнению с составом белка в целом, также заметное увеличение наблюдается для серина и треонина. Отрицательно заряженные остатки присутствуют в 80% белок-ДНК интерфейсов в количестве от 1 до 14. Анализ контактов между атомами выявил, что большая часть контактов между аминокислотами и нуклеотидами не затрагивает атомы нуклеиновых оснований, и в таких контактах затрагиваются только атомы сахарофосфатного остова.

Литература

1. *Медведев, Н.*, Метод Вороного-Делоне в исследовании некристаллических структур. - Новосибирск, 2000, : СО РАН.
2. *Anashkina A., Kuznetsov E., Esipova N., Tumanyan V.*, Comprehensive statistical analysis of residues interaction specificity at protein-protein interfaces // *Proteins* **67(4)**, 2007, pp. 1060-1077.
3. *Anashkina AA, Tumanian VG, Kuznetsov EN, Galkin AV, Esipova NG.* Geometrical analysis of protein-DNA interactions on the basis of the Voronoi-Delaune tessellation. *Biofizika* **53(3)**, 2008. Pp. 402-406.