

Модель «молекулярной векторной машины» для белкового фолдинга

Владимир А. Карасев, Виктор В. Лучинин

Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет, ул. Проф. Попова, 5, Санкт-Петербург 197376 Россия
e-mail: cmid@eltech.ru

Василий Е. Стефанов

Кафедра биохимии Санкт-Петербургского государственного университета, Университетская наб. 7/9, Санкт-Петербург, 199034, Россия
[e-mail@in.courier](mailto:in.courier)

В работе [1] была предложена модель структуры канонического набора из 20 аминокислот на додекаэдре, основанная на антисимметриях боковых цепей. Ряд моментов в работе [2] был проведен нами более последовательно (рис.1, а): введено три плоскости антисимметрии вместо двух; боковые цепи расположены сверху вниз в порядке возрастания размера; справа расположены более короткие боковые цепи, слева – их более тяжелые аналоги. В результате образовалось три группы боковых цепей – антисимметричных антиподов: относительно плоскости I (например Ser:Thr, и др.), относительно плоскости II (например, Ser:Cys и др.) и относительно плоскости III (например, Ser:His и др.). Кроме того, имеются пры боковых цепей, обладающих дополнительными в отношении размеров свойствами, расположенные на симметрично относительно центра (например, Ser:Trp и др.). Целью нашей работы был поиск путей практического использования этой структуры.

Согласно модели топологического кодирования белков [3], область водородной связи $N_iH \dots O_{i-4}=C_{i-4}$ 4х-звенного цикла белка является местом действия боковых цепей аминокислот (физических операторов), воссоздающих закодированную триплетами структуру. Развивая модель, мы выделили в этой области три плоскости и рассмотрели вектора действия на эту связь, которых также оказалось 20 [2]. Учитывая это, мы перенесли в эту область модель структуры аминокислот (рис.1, б), причем в вершину Gly, поместили NH-группу, а в центр додекаэдра – атом O_{i-4} . Вектора, действующие на связь $N_iH \dots O_{i-4}=C_{i-4}$, оказались направленными в вершины додекаэдра, соответствующие названиям боковых цепей

В результате боковые цепи аминокислот можно рассматривать в качестве неприводимых представлений группы векторов – диаметров додекаэдра [2], а саму структуру – как «молекулярную векторную машину». Модель объясняет ряд особенностей канонического набора аминокислот. Так, различная длина сходных по структуре (например, Asp–Glu) и противоположно заряженных (Asp–Arg) аминокислот может быть связана с реализацией действия векторов, направленных в разные стороны. Реализация действия векторов нижней грани додекаэдра (His, Trp, Phe, Tyr) требует жесткой структуры, поэтому эти боковые цепи оказались непередельными циклическими и т.д.

Векторная машина, как видно на рис.1,б, состоит из двух частей: блока додекаэдра и блока

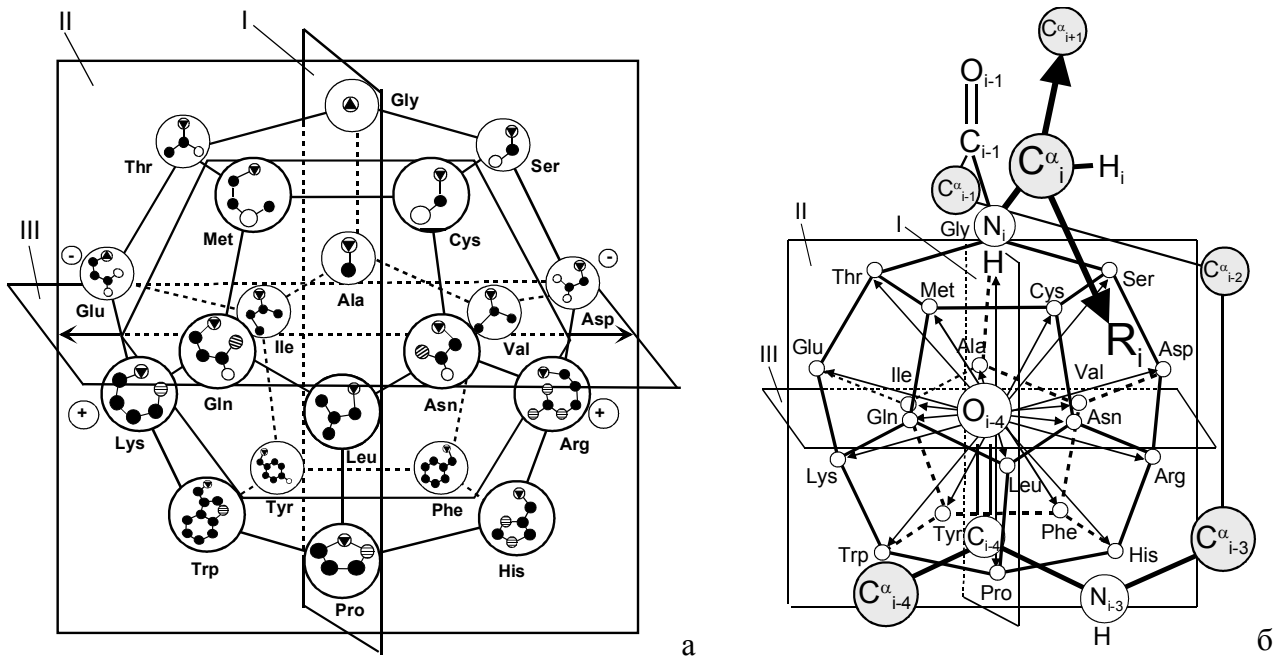


Рис. 1. Этапы построения модели молекулярной векторной машины для ко-трансляционного сворачивания белков.

а – модель структуры канонического набора аминокислот на додекаэдре.

I, II, III – плоскости антисимметрии. Боковые цепи ориентированы вниз, α -углеродные атомы - кружки с треугольником.

б - перенос структуры канонического набора аминокислот в область связи $N_iH...O_{i-4}=C_{i-4}$ 4х-звенного фрагмента белка.

тетраэдра (i -го α -углеродного атома). Боковые цепи, связанные с i -м α -углеродным атомом, ориентируются на соответствующие вершины додекаэдра и воссоздают закодированную структуру [3], а сопряженный поворот тетраэдра на определенный угол задает направление связи с $i+1$ -м α -углеродным атомом цепи [2]. Предполагается, что работа машины, связанная с ростом цепи, может обеспечивать ко-трансляционное сворачивание белков. В настоящее время модель апробируется на известных α -спиральных и β -структурных фрагментах белков.

Литература

1. V.A. Karasev et al. (2005) A dodecahedron-based model of spatial representation of the canonical set of amino acids. In: *Mathematical Biology and Medicine, Vol.8*. International Conference. "Advances in Bioinformatics and Its Applications", World Scientific Publ. Co., 482-493.
2. В.А.Карасев (2007) Аминокислоты канонического набора как неприводимые представления группы векторов – диаметров додекаэдра. Деп. в ВИНТИ от 25.04.07, № 461-B2007
3. V.A. Karasev, V.E. Stefanov (2001). Topological nature of the genetic code. *J.Theor.Biol.* **209**:303-317.