

Предсказание структуры белка SaHPF методами компьютерного моделирования

Аюпов Рустам Хасанович

Аспирант

Казанский (Приволжский) федеральный университет, Институт фундаментальной медицины и биологии, Казань, Россия

E-mail: aurusta@mail.ru

SaHPF - белок *S.aureus* (гомологичный HPF белку *E.coli*) предположительно взаимодействует с 30S субъединицей рибосомы [1, 2] и меняет ее конформацию таким образом, что две рибосомы связываются между собой. Подобный механизм взаимодействия приводит к отключению синтеза белка и клетка переживает неблагоприятные условия среды.

S.aureus — грамположительная бактерия, являющаяся причиной множества заболеваний, в том числе нозокомиальных инфекций. Структурные исследования в области рибосомы *S.aureus* проводятся с целью выяснения особенностей регуляции синтеза белков для последующего создания новых лекарственных препаратов.

Модель структуры белка была построена с помощью следующих программ: I-Tasser, Robetta, QUARK, Phyre2, Swiss-Model. Всего было построено 24 структуры модели белка. С помощью программы Qmean были оценены качества построенных моделей. Лучшей структурой белка оказалась модель, построенная в программе Robetta. При построении данной модели, программа ориентировалась на две существующие структуры других белков (PDB: 1imu_A, 3lyv_A). Белок состоит из двух доменов, и существенные отличия в предсказанных моделях были связаны с расположением данных доменов относительно друг друга. В дальнейшем построенные модели могут быть полезны при разрешении структуры белка с помощью метода ЯМР.

Источники и литература

- 1) Polikanov, Y., Blaha, G. & Steitz, T. (2012). How hibernation factors RMF, HPF, and YfiA turn off protein synthesis. *Science* 336(6083), 915-918.
- 2) Ueta, M., Wada, C. & Wada, A. (2010). Formation of 100S ribosomes in *Staphylococcus aureus* by the hibernation promoting factor homolog SaHPF. *Genes to Cells* 15, 43-58.

Слова благодарности

Выражаю благодарность научным руководителям Акберовой Н.И. и Юсупову М.М.

Иллюстрации

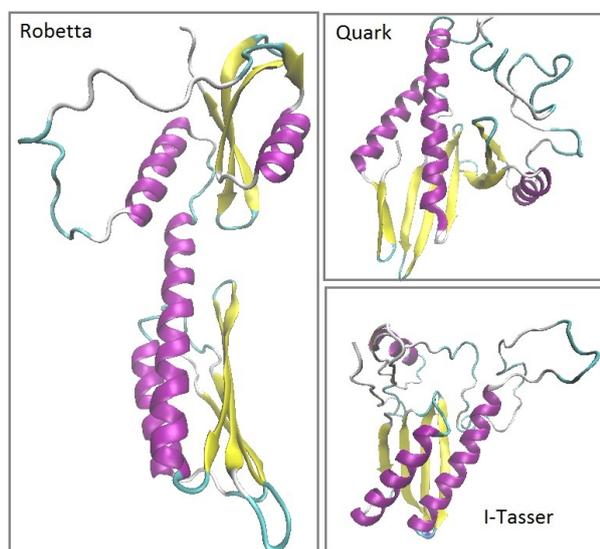


Рис. 1. Предсказанные модели белка SaHPF с различными укладками доменов