

КОМПЬЮТЕРНЫЙ АНАЛИЗ СИСТЕМ СОПРЯЖЕННЫХ ИОННО-ВОДОРОДНЫХ СВЯЗЕЙ В БЕЛКАХ

Е.Л. Демченко, В.А. Карасев

Санкт-Петербургский государственный электротехнический
университет, 197376, Санкт-Петербург

С целью анализа систем сопряженных ионно-водородных связей (ССИВС), рассматриваемых в качестве основы построения надмолекулярных биоструктур и универсальных каналов переноса зарядов [1], проведено математическое моделирование ССИВС и их трассировка в олигомерных белках, с использованием компьютерной программы Protein 3D [2]. В качестве модельного объекта была проанализирована тетрамерная структура гемоглобина человека, находящегося в трех состояниях: окси-, деокси- и монооксигенированном. Координаты атомов структур белков получены из Protein Data Bank. Найдено, что в отдельных субъединицах большое число ССИВС имеют малую протяженность, тогда как в комплексах α - β субъединиц и в тетрамерах за счет групп, находящихся в других субъединицах, ССИВС объединяются и частично переходят из одной субъединицы в другую. В зависимости от степени окисленности в структуре ССИВС происходят некоторые изменения. В целом, в структуре гемоглобина полностью реализуется принцип непрерывности ССИВС.

Литература

1. Карасев В.А., Стефанов В.Е., Лучинин В.В.// Биотехнология. - 1993. - No. 2. - С. 3-15.
2. Компьютерная программа «Protein 3D», Зарегистрир. в Рос АПО, No. 980143 от 03.05.98, авторы: Карасев В.А., Демченко Е.Л.