

РАСПОЗНАВАНИЕ БОРОЗДОК ДНК БЕЛКАМИ

Анашкина А.А., Кузнецов Е.Н.¹, Туманян В.Г., Есипова Н.Г.

ФГБУН Институт молекулярной биологии им. В.А. Энгельгардта РАН, Россия, 119991,
Москва, ул. Вавилова, 32, nastya@eimb.ru

¹ ФГБУН Институт проблем управления РАН, Россия, 117997, Москва, ул.
Профсоюзная, 65.

Методом Вороного Делоне рассчитаны контакты между атомами белка и ДНК для выборки из 3269 белок-ДНК комплексов, отдельно для большой и малой бороздок ДНК. Построены распределения площадей контактов и длин контактов, на уровне остатков и на атомном уровне. Показана уникальность бороздок ДНК в аспекте картины контактов, скрытая при рассмотрении суммарной статистики для обеих бороздок. Отдельно для обеих бороздок проведена кластеризация аминокислот по признакам взаимодействия с нуклеотидами ДНК. Выделены важнейшие для белок-нуклеинового узнавания взаимодействия, т.е. специфические взаимодействия отделены от стохастических. Показано существование особой зоны на трехмерной гистограмме контактов между атомами белка и ДНК (по признакам площади контакта и расстоянию между взаимодействующими атомами одновременно). Проанализированы взаимодействия, попадающие в эту зону, и позиционированы относительно бороздок ДНК. Полученные результаты существенны для предсказания вероятности связывания конкретного белка с ДНК и конкретных белок-нуклеиновых интерфейсов, и, в частности, прогноза того, с какой бороздкой будет образован комплекс. Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, проект 15-04-99605а.

Литература

1. *Namiot V. A. et al.* Long-range macromolecule interaction and “speed reading” long nucleotide sequences in DNA // *Physics Letters A.* – 2013. – Т. 377. – №. 3. – С. 323-328.
2. Анашкина А. А. и др. Классификация аминокислотных остатков на основе сравнительного анализа контактов в структурах комплексов белок-ДНК и специфические взаимодействия ДНК-белок // *Биофизика.* - 2013. - Т. 58, № 6. - С. 975-980.
3. Анашкина А. А., Есипова Н. Г., Кузнецов Е. Н., Туманян В. Г. Специфичность контактов в комплексах белок-ДНК // *Компьютерные исследования и моделирование.* – 2009. – Т. 1. – № 3. – С. 281–286.
4. Анашкина А. А. и др. Геометрический анализ ДНК-белковых взаимодействий на основе метода Вороного-Делоне // *Биофизика.* – 2008. – Т. 53. – №. 3. – С. 402-406.
5. *Anashkina A. et al.* Comprehensive statistical analysis of residues interaction specificity at protein–protein interfaces // *Proteins: Structure, Function, and Bioinformatics.* – 2007. – Т. 67. – №. 4. – С. 1060-1077.