

СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ МЕТОДОВ МОЛЕКУЛЯРНОГО ДОКИНГА ДЛЯ МОДЕЛИРОВАНИЯ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ПЕПТИДА БЕЛКА FtsZ С БЕЛКАМИ SepF И FtsA

Васюченко Е.П., Холина Е.Г., Гудимчук Н.Б., Коваленко И.Б.

Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, Биологический факультет, кафедра биофизики, Россия, 119992, г. Москва, Ленинские горы, 1-24

Бактериальное клеточное деление является фундаментальным биологическим процессом, обеспечивающим рост и размножение клеток, и осуществляется при участии комплекса белков, известного как дивисома. Одним из центральных компонентов дивисомы является белок FtsZ — структурный и функциональный аналог эукариотического тубулина, формирующий динамичное Z-кольцо в месте будущей септации. Для выполнения своих функций FtsZ взаимодействует с рядом белков-партнёров, среди которых важную роль играют FtsA и SepF, участвующие в стабилизации Z-кольца и его связывании с цитоплазматической мембраной.

Известно, что значительная часть взаимодействий FtsZ с белками-партнерами реализуется через его короткий C-концевой пептидный участок. Этот участок характеризуется высокой конформационной гибкостью и способен связываться с различными белковыми поверхностями, что делает его удобной модельной системой для изучения белок–пептидных взаимодействий.

Настоящая работа посвящена изучению взаимодействия пептида FtsZ с белками SepF и FtsA с использованием методов белок–белкового и белок–пептидного докинга. Основной целью исследования является анализ и сопоставление различных вычислительных подходов и программных средств, применяемых для моделирования подобных взаимодействий, а также оценка их применимости к системам с участием коротких и гибких пептидов.

В рамках работы были использованы доступные экспериментальные структуры белков SepF и FtsA с пептидным фрагментом FtsZ в качестве исходных моделей для проведения расчётов докинга. Рассматриваемые методы отличаются используемыми алгоритмами поиска конформационного пространства, степенью учёта гибкости компонентов и типами оценочных функций. Особое внимание уделено особенностям моделирования интерфейсов взаимодействия, характерных для комплексов FtsZ–SepF и FtsZ–FtsA.

Для анализа получаемых моделей докинга были использованы структурные критерии, включающие оценку геометрического соответствия комплексов, анализ межмолекулярных контактов и пространственной организации интерфейса взаимодействия. Эти данные сравнивались с известными структурами комплексов.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 25-44-01015, <https://rscf.ru/project/25-44-01015/>).