

**Доработка, отладка и применение программы пространственного
выравнивания ДНК-белковых комплексов.**

Научный руководитель – Спирин Сергей Александрович

Гумеров Руслан Ильдарович

Студент (специалист)

Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, Факультет
биоинженерии и биоинформатики, Москва, Россия

E-mail: ruslan0gumerov@gmail.com

Сравнительный анализ сходных структур белков часто помогает выявлять особенности структур, важные для их функции. Структуру белков можно охарактеризовать с помощью геометрического ядра - набор аминокислотных остатков с одинаковым пространственным расположением среди разных белков семейства. Геометрическое ядро рассматривается не только для структур отдельных белков, но и для белок-белковых и ДНК-белковых комплексов. ДНК-связывающие белки образуют семейства, в пределах которых консервативна укладка белковой молекулы и ее расположение на спирали ДНК. Ранее, была разработана программа StructAlign [2], служащая для выравнивания макромолекулярных, в т.ч. ДНК-белковых комплексов и программа LCore [1], позволявшая выявлять геометрическое ядро в подаваемом на вход семействе структур белков или макромолекулярных комплексов.

Целью данной работы являлась отладка и тестирование программы StructAlign, а также её интеграция в программу для поиска геометрических ядер LCore, с последующим анализом результатов. По сравнению с предыдущей версией программы StructAlign, были устранены ошибки, мешающие корректной компиляции программы на разных платформах, а также ряд недочетов, искажающих финальный результат. Помимо этого, были изменены выходные файлы программы для достижения совместимости с программой LCore. В ближайшее время планируется обновление входного интерфейса программы, а также обновление веб-интерфейса к программе web версии. Также, планируется изучить консервативные структурные особенности комплексов ДНК и транскрипционных факторов нескольких семейств с помощью обновленной версии программы.

Источники и литература

- 1) Вакуленко Ю.А., Нагаев Б.Э., Алексеевский А.В., Карягина А.С., Спирин С.А., Новая программа для выявления геометрического ядра набора структур комплексов макромолекул. // Биохимия, том 81, 2016, вып. 4. С. 580-584.
- 2) Попов Я.В., Галицына А.А., Алексеевский А.В., Карягина А.С., Спирин С.А., StructAlign – Программа для выравнивания структур ДНК-Белковых комплексов. // Биохимия, том 80, 2015, вып. 11. С. 1683-1687.