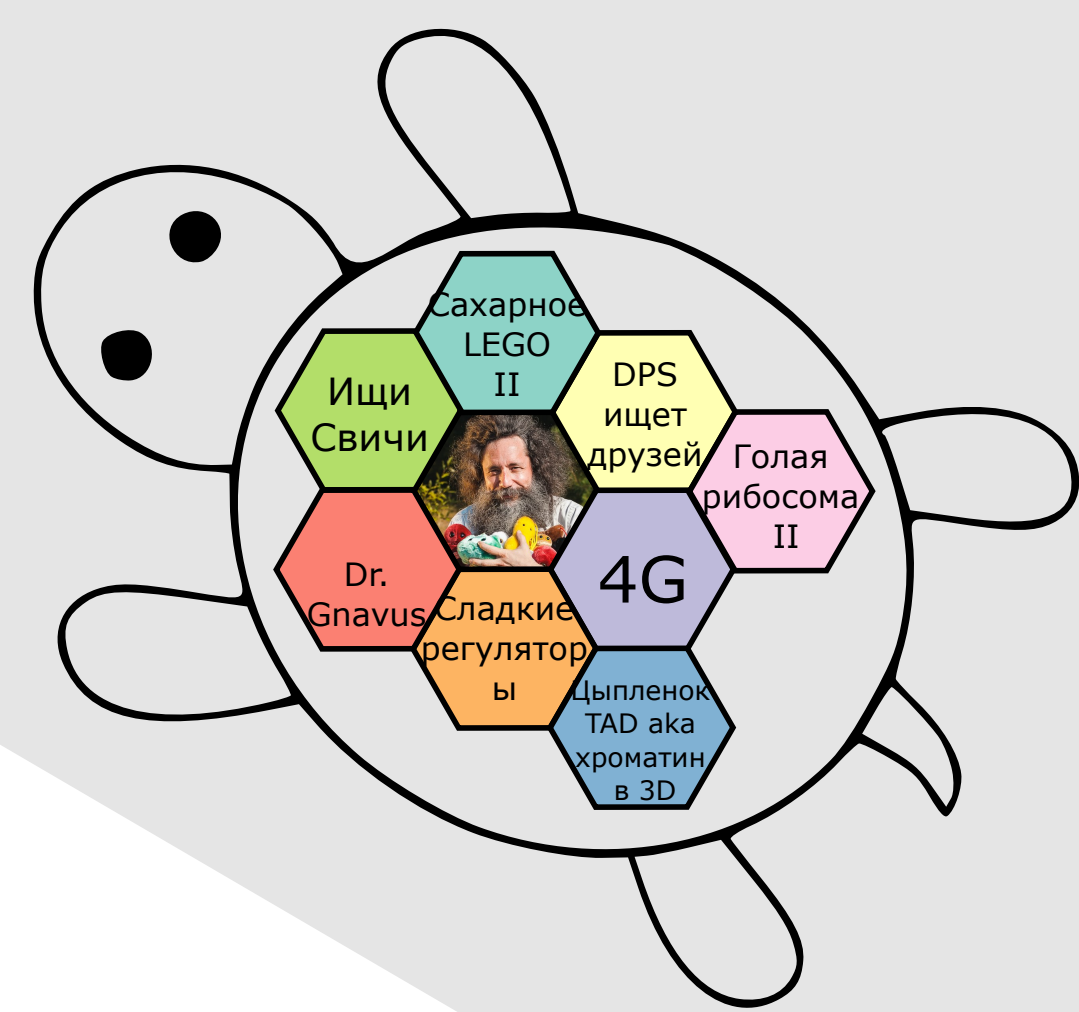




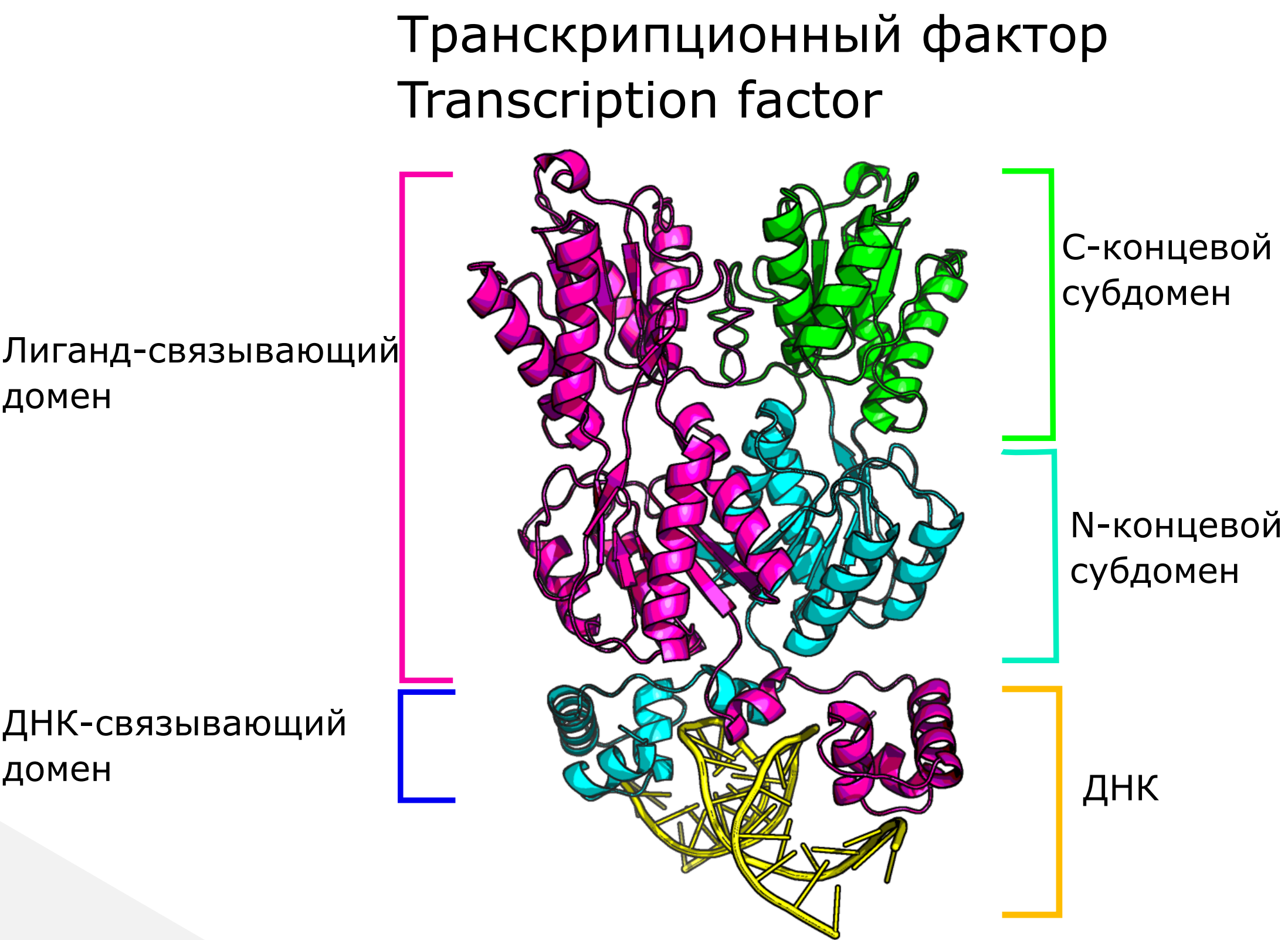
Сладкие регуляторы

Lucky LacI regulators

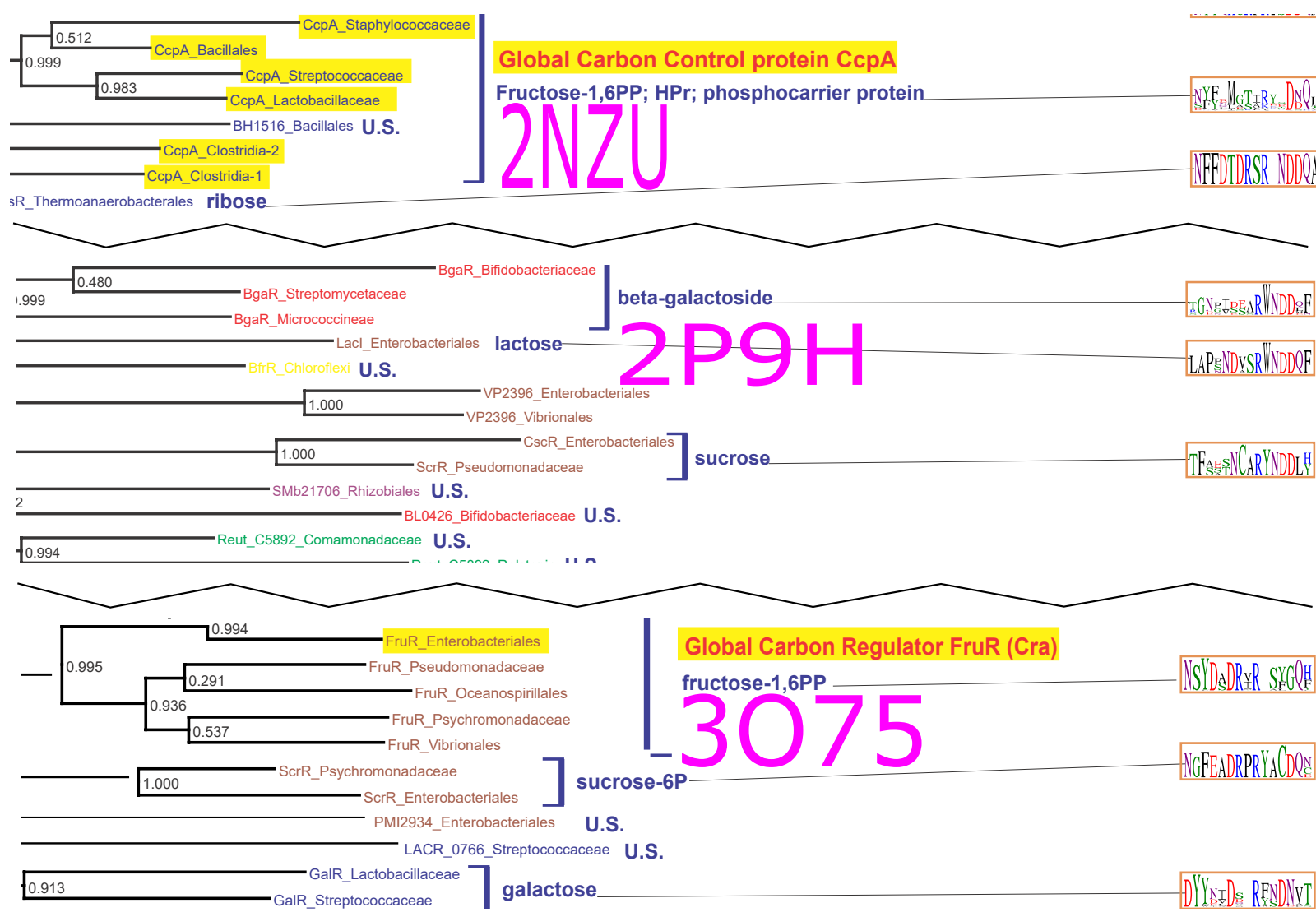
В. Сторожилова*, Ю. Коростелёв
V. Storozhilova*, Y. Korostelev

Введение

В предыдущей работе были предсказаны позиции, определяющие специфичность к различным лигандам белков семейства LacI (SDPs). Данные белки являются транскрипционными факторами. В работе были исследованы эти позиции на трехмерных структурах. Мы хотели найти аминокислоты, запрещающие связывание белка с определенным сахаром.



Филогенетическое дерево семейства LacI Phylogenetic tree of the LacI family



Материалы и методы

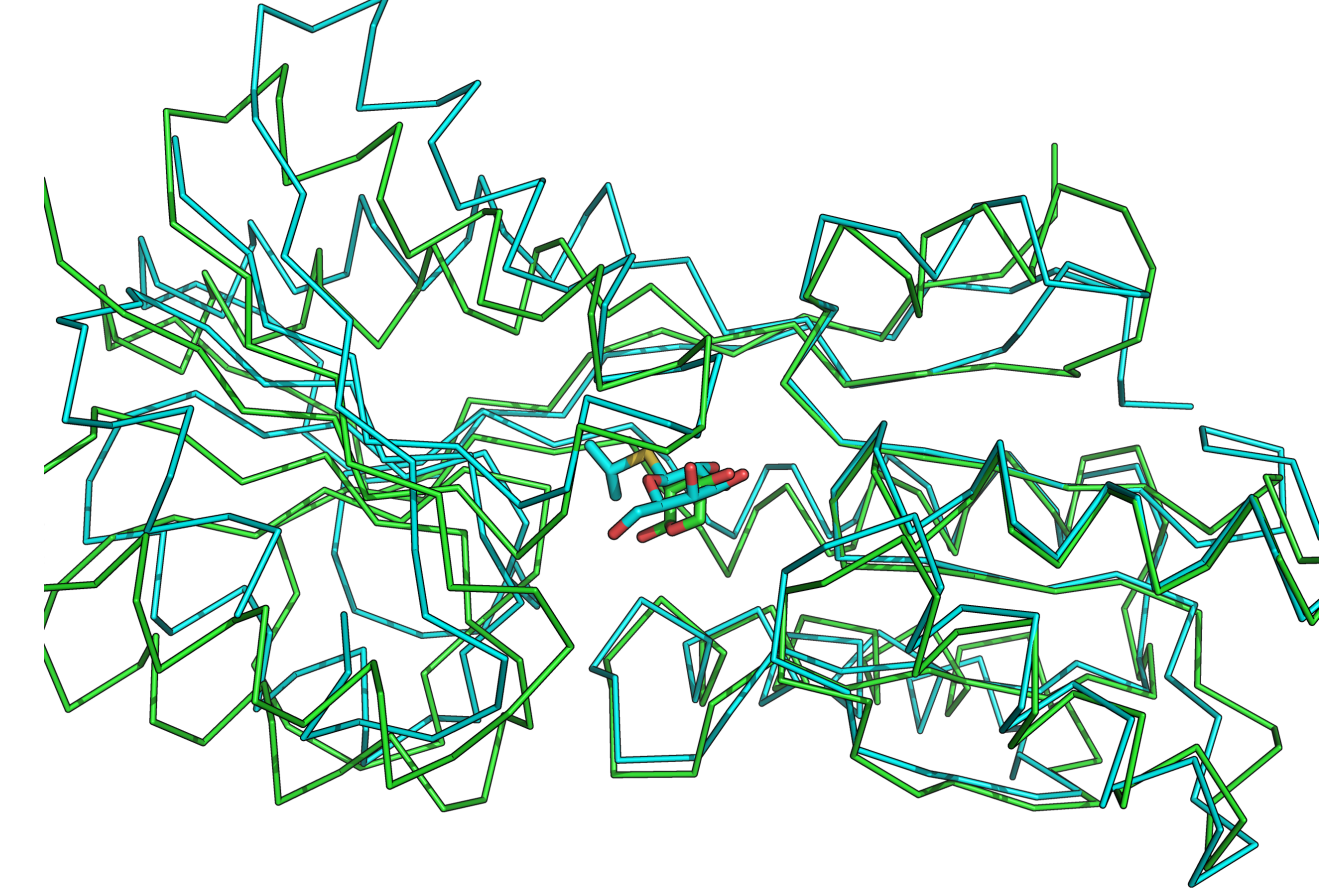
8 известных пространственных структур представителей семейства LacI были наложены в программе SwissPDB Viewer.

Белки и их контактирующие позиции с лигандом визуализированны и исследованы в PyMol.

Моделирование мутации было произведено в программе SwissPDB Viewer.

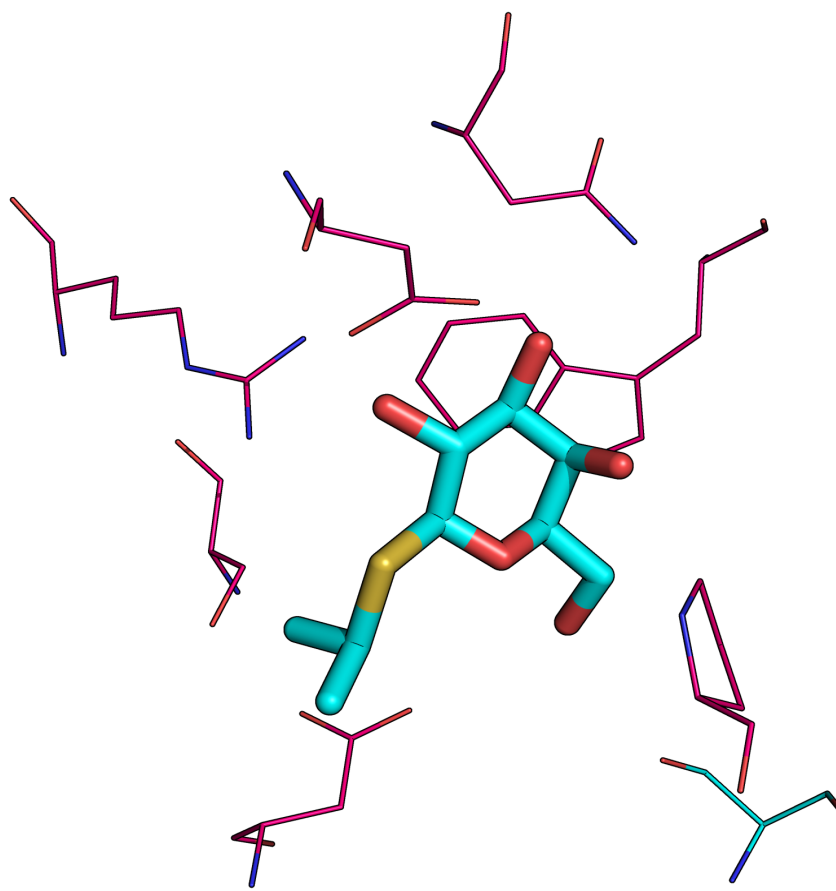
PDBid	Белок	Лиганд
2GX6	rbsB	RIBOSE(PYRANOSE FORM)
1BYK	TreR	TREHELOSE-6-PHOSPHATE
3K4H	Bcer	MALTOSE
3075	fruR	1-O-PHOSPHONO-BETA-D-FRUCTOFURANOSE
3CTP	Amet	BETA-D-XYLULOSE
2NZU	ccpA	BETA-D-GLUCOSE-6-PHOSPHATE
2P9H	lacI	ISOPROPYL-1-BETA-D-THIOGALACTOSIDE
3TB6	araR	BETA-L-ARABINOSE

Наложение сахар-связывающих доменов Fitting of sugar-binding domains



Контактирующие позиции и SDP Contacts and SPDs

2GX6	2P9H	3TB6	3CTP	3K4H	3075	2NZU	SDP
28			28		28	28	28
		29				29	
30	30	30	30	30	30	30	30
31	31	31		31	31	31	31
					61		61
		87		87			87
			88	88			
115	115	115	115	115	115		115
116					116		116
	176	176		176			176
180	180	180	180	180			180
207	207	207		207	207	207	207
		236			236		
237	237	237	237	237	237	237	237
					238	238	238
266	266	266	266	266	266		266
283		283	283		283		283
							285



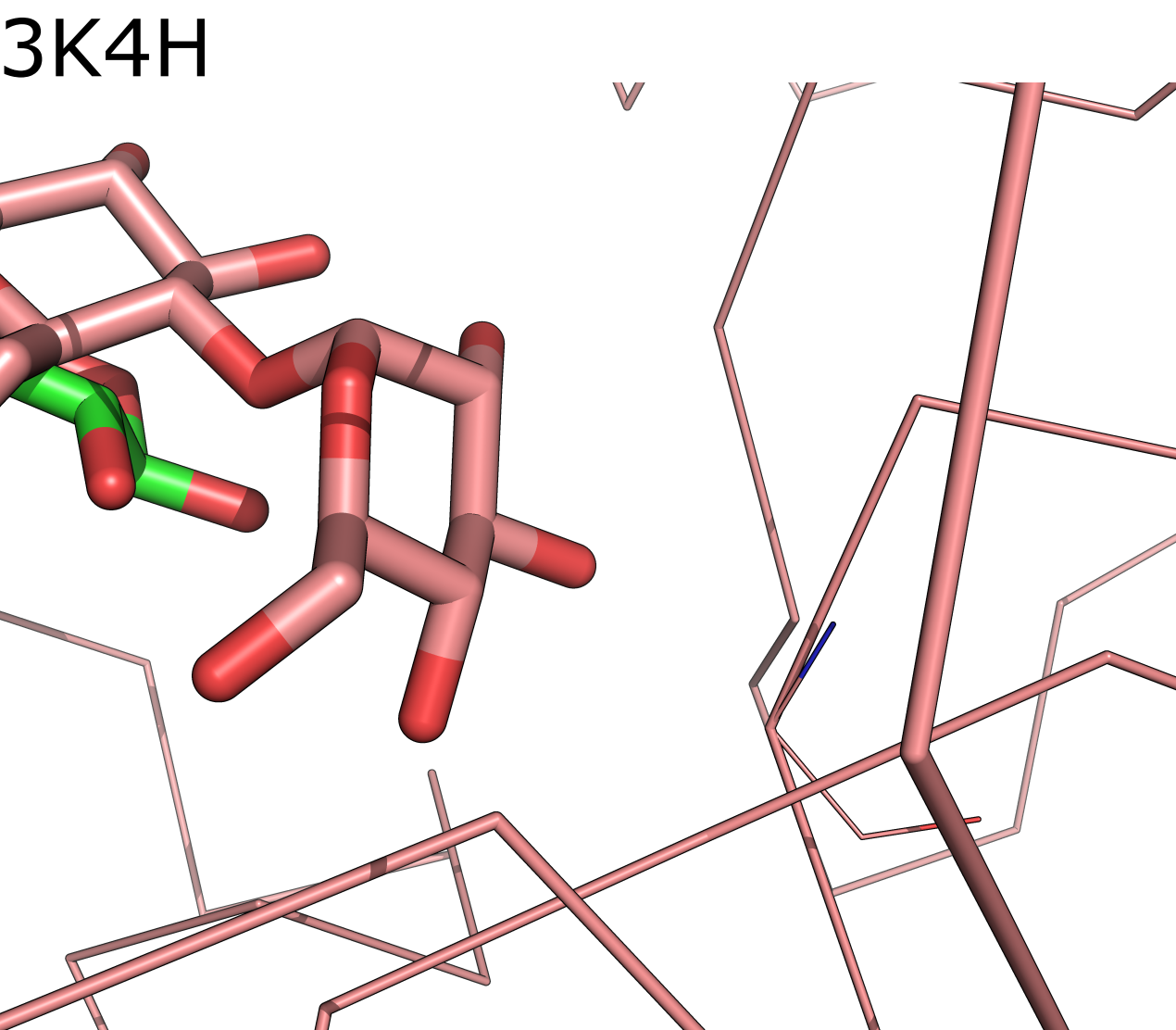
Выводы

Были наложены 8 пространственных структур представителей семейства LacI.

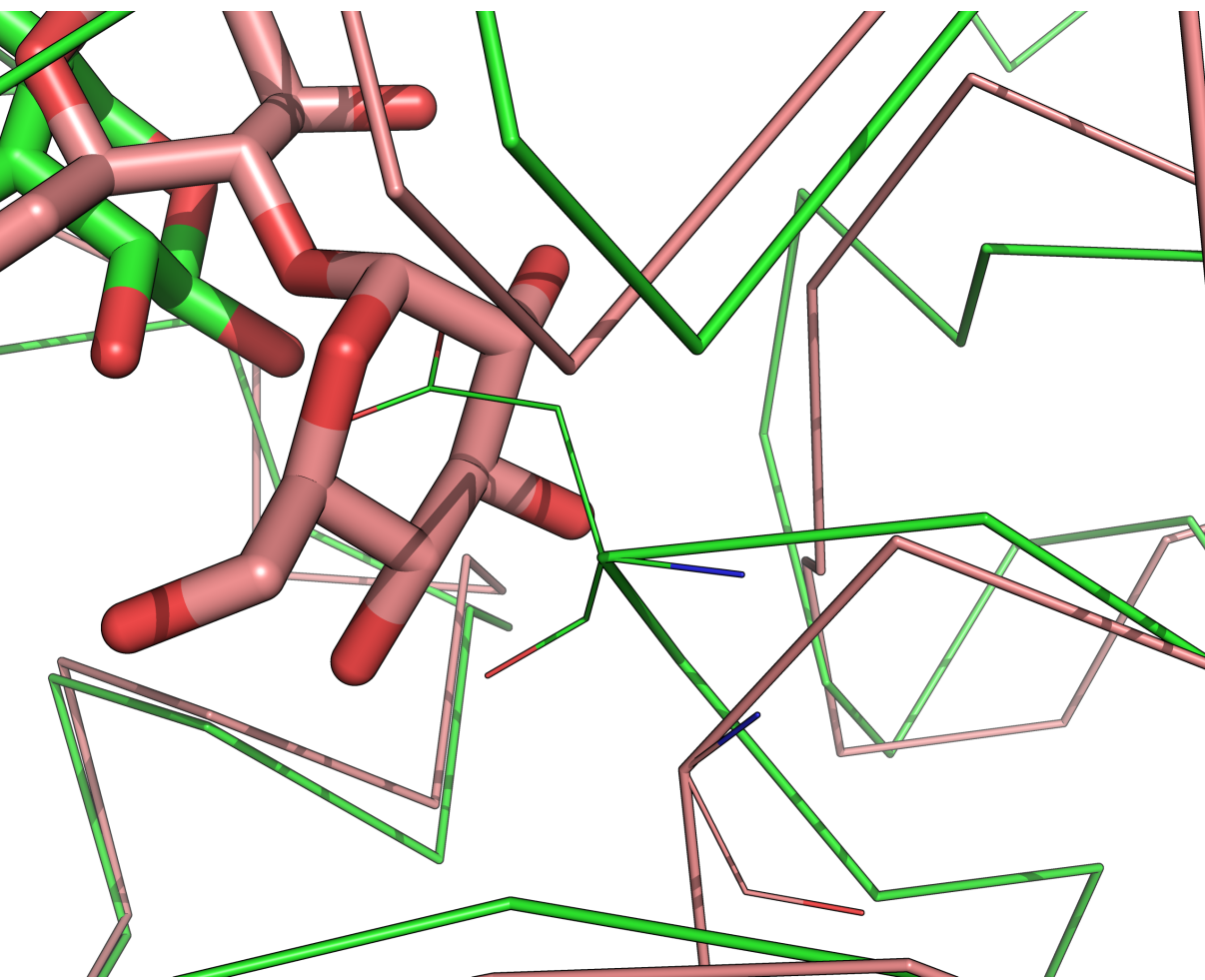
Был сопоставлен список SDP и контактирующих позиций. Позиции, контактирующие с лигандом в большинстве структур, оказались позициями SDP.

При анализе структур обнаружено, что в наилучшей SDP-позиции Asp запрещает связывание белком дисахарида.

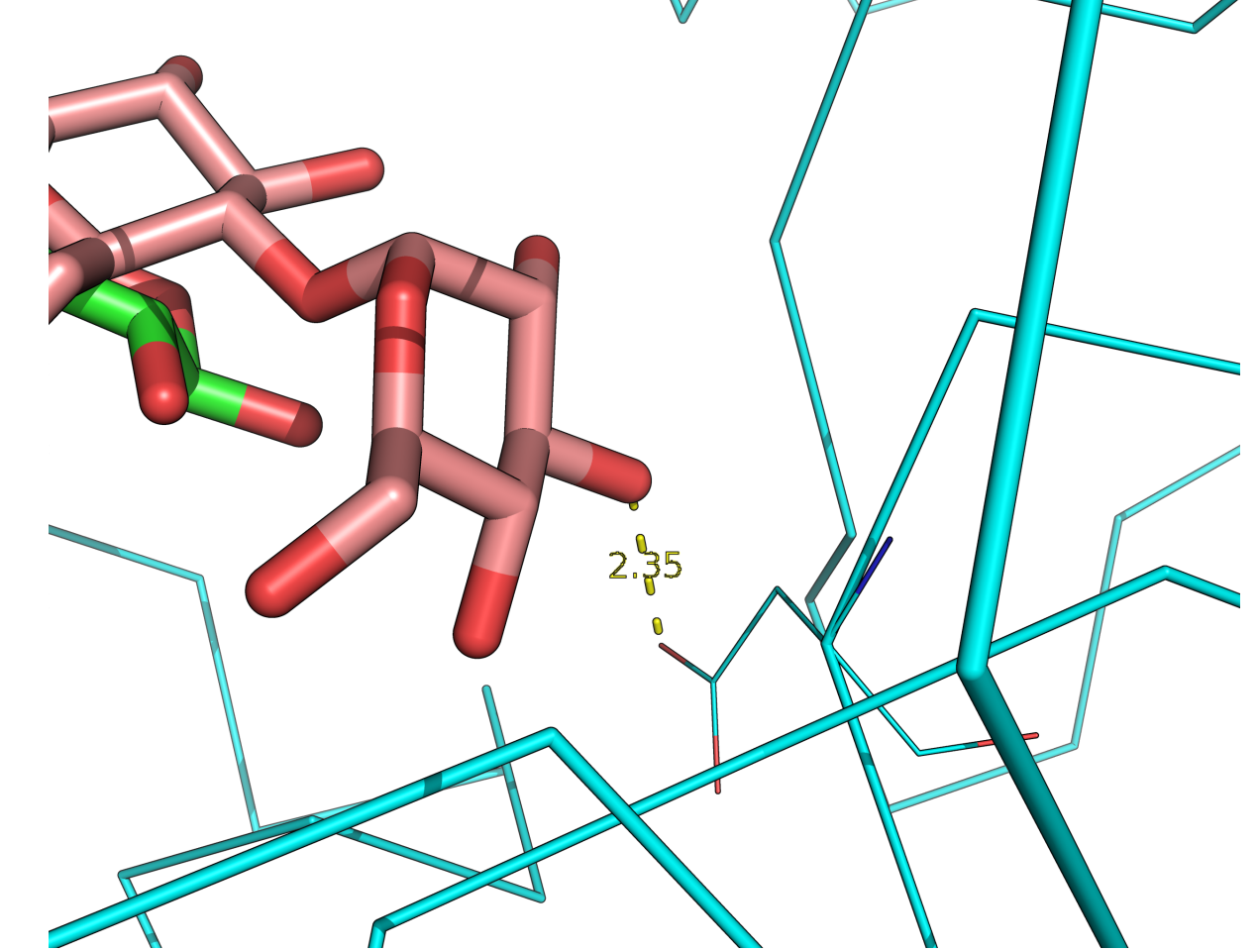
Моделирование мутации Gly -> Asp Modelling mutation



3K4H and 2GX6



Modelling Mutation



Ошибка в расположении лиганда Error in the ligand's position

