

ПРЕДСКАЗАНИЕ ПРОСТРАНСТВЕННОЙ МОДЕЛИ CFR БЕЛКА STAPHYLOCOCCUS AUREUS

Аюпов Р.Х., Акберова Н.И

ФГАОУ ВПО Казанский (Приволжский) федеральный университет,
Казань, Россия

546368686fbee

Белок CFR (chloramphenicol & florfenicol resistance) - метилтрансфераза, фермент катализирующий реакцию метилирования азотистого основания аденозинового остатка в положении 2503 большой субъединицы рРНК [1]. В ходе метилирования рРНК белок является мишенью антибиотиков и *S. aureus* приобретает устойчивость к их действию [2]. Данный белок представлен в геноме у родственных бактерий: *S. sciuri*, *S. warneri*. А также у других бактерий: *Bacillus amyloquelificans subsp. plantarum*, *Bacillus clausii*, *Clostridium botulinum*, *Clostridium phytofermentans* [3].

Поиск гомологичных аминокислотных последовательностей в Blast показал наличие двух последовательностей *E. coli* с экспериментально определенными структурами (идентификаторы в PDB: 3RF9.pdb и 3RFA.pdb). Было проведено множественное выравнивание аминокислотных последовательностей данных белков с последовательностью CFR (gi 205829896). Результаты выравнивания показывают, что данные белки имеют множество схожих участков.

Для предсказания модели использовали следующие программы: FUGUE, MUSTER, Robetta, I-Tasser, SWISS-MODEL, PSIPred, Phyre2, HHpred. Полный список программ для предсказания пространственных моделей структур расположен на сайте ExPASy [4]. Каждая программа выдает от 1 до 10 различных моделей белка. Качество предсказанных моделей анализировали с использованием программы QMEAN [5]. Наилучшей структурой оказалась одна из пяти моделей CFR, предсказанная программой Robetta. Предсказанную модель белка предполагается использовать в дальнейшей работе по моделированию структурного взаимодействия с различными лигандами в ходе разработки ингибиторов метилазы CFR.

Литература

1. A radically different mechanism for S-adenosylmethionine-dependent methyltransferases // Grove T.L., et. al. – Science 332:604-607(2011)
2. First report of cfr-mediated resistance to linezolid in human staphylococcal clinical isolates recovered in the United States // Mendes R.E., et. al. – Antimicrob. Agents Chemother. 52:2244-2246(2008)
3. <http://enzyme.expasy.org/EC/2.1.1.224>
4. <http://www.expasy.org/tools/>
5. <http://swissmodel.expasy.org/qmean/cgi/index.cgi>