



Идентификация распределения гидрофобных областей и пространственного заряда в первичной структуре полипептидов методами фрактального анализа

А.Т. Мухаметшин, А.Р. Каюмов, О.А. Маркелов, М.И. Богачев

Исследованы свойства распределения аминокислотных остатков в белках различных функциональных групп у патогенных грамположительных и грамотрицательных микроорганизмов применительно к гидрофобности, полярности и пространственному заряду. Установлено, что мембраносвязанные белки грамположительных микроорганизмов характеризуются более выраженной кластеризацией аминокислотных остатков с одинаковыми свойствами, в особенности по гидрофобности, а мультифрактальные свойства отмечаются только при анализе распределения пространственного заряда.

Ключевые слова: фрактальный анализ, аминокислоты, полярность, гидрофобность, флуктуационные функции.

We investigated the distribution of amino acids in proteins of two functional groups from gram-positive and gram-negative bacteria for hydrophobicity, polarity and side chain charge of amino acids. We found that (i) clustering of amino acids with similar properties in membrane-bound proteins is significantly more pronounced in gram-positive bacteria compared to gram-negative ones, especially for hydrophobicity; (ii) multifractal features have been observed only in side chain charge studies.

Keywords: fractal analysis, amino acids, hydrophobicity, polarity, fluctuation functions.

В живых системах бесконечное разнообразие белков определяется комбинацией 20 основных аминокислот. Их положение в первичной последовательности молекулы определяет ее фолдинг – сворачивание во вторичную, а потом и в третичную структуру [1]. Расположение аминокислот в местах возможного контакта с полярным растворителем строго определяет положение каждой из 20 аминокислот внутри белковой глобулы. Третичная структура белка определяется двумя факторами – взаимным расположением аминокислот в цепи, а также их зарядом и степенью гидрофобности. В результате зрелый белок содержит гидрофобное ядро, которое недоступно для контакта с растворителем и состоит из гидрофобных аминокислот [2]. С другой стороны, полярные аминокислоты гидрофильными функциональными группами находятся на внешней стороне и взаимодействуют с растворителем, которым в природе и в клетках служит вода. Очень часто они взаимодействуют и между собой – положительно и негативно заряженные остатки образуют солевые мостики. Кроме того, полярные аминокислоты участвуют в образовании

© Авторы, 2012

**Айрат Тагирович
Мухаметшин –**
аспирант,

кафедра сопротивления материалов
и основ теории упругости,
ФГОУ ВПО
«Казанский государственный
архитектурно-строительный
университет».

E-mail: airat-mat@mail.ru

**Айрат Рашитович
Каюмов –**

к.б.н., ст. преподаватель,
кафедра водоснабжения
и водоотведения,
ФГОУ ВПО

«Казанский государственный
архитектурно-строительный
университет».

E-mail: kairatr@yandex.ru

**Олег Александрович
Маркелов –**

аспирант,
кафедра радиотехнических систем,
СПбГЭТУ «ЛЭТИ»
им. В.И. Ульянова (Ленина).

E-mail: omarkelov@yandex.ru

**Михаил Игоревич
Богачев –**

к.т.н., докторант,
кафедра радиотехнических систем,
СПбГЭТУ «ЛЭТИ»
им. В.И. Ульянова (Ленина).

E-mail: roge@mail333.com