

## Новый алгоритм расчета кривых малоуглового рентгеновского рассеяния на глобулярных белках

Научный руководитель – Красиков Валерий Дмитриевич

*Семенов Андрей Михайлович*

*Сотрудник*

Институт высокомолекулярных соединений РАН, Санкт-Петербург, Россия

*E-mail: andy\_semenov@mail.ru*

Вопрос о точном пространственном строении белков в растворе является одним из важнейших в современной биохимии. Одним из методов, применяемых для установления строения белков, является метод рентгеновского малоуглового рассеяния (saxs). Угловая зависимость интенсивности малоуглового рассеяния (кривая рассеяния) раствора белковых молекул дает богатую информацию о структуре этих молекул в нативном состоянии. Важное место в изучении белков с помощью малоуглового рассеяния занимают теоретические расчеты кривых рассеяния[2].

До недавнего времени большинство программ основывалось на предположении, что структура белка в растворе совпадает со структурой его в кристалле, однако возникает вопрос насколько указанное предположение справедливо, так как при переходе белка в раствор могут происходить перестройки структуры, как самого белка, так и структурирование прилежащей к нему воды, что может заметно изменить вид кривой рассеяния[1].

В связи с изложенным был разработан новый эффективный алгоритм расчета кривых малоуглового рентгеновского и нейтронного рассеяния использующий в качестве входных данных фреймы молекулярной динамики, и реализация его в виде программы использующей графический адаптер для аппаратного ускорения вычислений.

Разработанный алгоритм состоит из двух частей: построения рассеивающей системы и собственно расчета кривой рассеяния. В ходе построения рассеивающей системы из фреймов молекулярной динамики вырезаются фрагменты, содержащие белок и окружающий растворитель, и такого же размера и формы фрагменты вырезаются из фреймов молекулярной динамики растворителя, для учета рассеяния на нем. Точки на кривой рассеяния рассчитываются как суммы рассеяния от отдельных атомов и атомных групп, с учетом различных направлений падения пучка излучения на молекулу белка.

Разработанная программа была оттестирована на ряде белков и показала хорошую скорость и точность расчета.

Исходный код разработанной программы опубликован по адресу: <https://github.com/andy-biochem/saspar2>

### Источники и литература

- 1) Chen P., Hub J. S. Validating Solution Ensembles from Molecular Dynamics Simulation by Wide-Angle X-ray Scattering Data // Biophysical Journal, 2014, V. 107, P. 435-447
- 2) Hub J. S. Interpreting solution X-ray scattering data using molecular simulations // Current Opinion in Structural Biology. 2018, V. 49, P. 18–26