

**Дополнительные центры связывания ионов цинка в гемоглобине:
теоретический анализ рентгеновских спектров поглощения**

Научный руководитель – Яловега Галина Эдуардовна

Пронина Екатерина Вячеславовна

Аспирант

Южный федеральный университет, Физический факультет, Кафедра физики твердого тела, Ростов-на-Дону, Россия

E-mail: ev_pronina_105@mail.ru

Известно, что нарушение пространственной структуры белка может приводить к образованию нефункциональных структур или белков со сниженной активностью при формировании комплексов с переходными металлами [2], [3]. Одной из самых значимых белковых структур для жизнедеятельности человека является гемоглобин. Под воздействием неблагоприятных факторов в гемоглобине могут возникать дополнительные центры связывания, способные связывать такие нетипичные для гемоглобина ионы как цинк.

На основе данных Protein Data Bank (PDB) были построены возможные структурные модели дополнительных центров связывания гемоглобина с ионами цинка: модель связывания цинка с гистидином, глутамином, цистеином и аспарагиновой кислотой. Для данных моделей были рассчитаны теоретические спектры рентгеновского поглощения XANES для К-края цинка и сопоставлены с экспериментальным спектром из работы [1].

Сопоставление экспериментального и теоретических спектров рентгеновского поглощения для различных структурных моделей показало, что спектры XANES чувствительны к изменениям локального окружения ионов цинка в белках - межатомным расстояниям и углам связи.

На основе теоретического анализа спектров XANES были определены вероятные сайты связывания ионов цинка в гемоглобине, включающие аминокислоты цистеин и гистидин.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект №19-29-12052мк)

Источники и литература

- 1) Н. Н. Новикова, С. Н. Якунин, М. В. Ковальчук, Э. А. Юрьева, Н. Д. Степина, А. В. Рогачев, М. А. Кременная, Г. Э. Яловега, О. В. Космачевская, А. Ф. Топунов Возможности рентгеновской абсорбционной спектроскопии в геометрии полного внешнего отражения для исследования белковых пленок на жидкости // Кристаллография. 2019. Т.64, №6, с.931-937
- 2) Gomes, Cláudio M. (2019). Biophysical and Spectroscopic Methods for Monitoring Protein Misfolding and Amyloid Aggregation // [Methods in Molecular Biology, Protein Misfolding Diseases Volume 1873 (Methods and Protocols), 10.1007/978-1-4939-8820-4(Chapter 1), 3–18.
- 3) Reeg, Sandra; Grune, Tilman, Protein Oxidation in Aging: Does It Play a Role in Aging Progression? // Antioxidants & Redox Signaling, 2015, 23(3), 239–255.