ВНУТРИМОЛЕКУЛЯРНАЯ ПОДВИЖНОСТЬ С-КОНЦЕВОГО ЦИТОКИН-ПОДОБНОГО МОДУЛЯ ТИРОЗИЛ-тРНК СИНТЕТАЗЫ МЛЕКОПИТАЮЩИХ: ИЗУЧЕНИЕ МЕТОДОМ МОДЕЛИРОВАНИЯ МОЛЕКУЛЯРНОЙ ДИНАМИКИ

Одынец К.А., Каниболоцкий Д.С., Скурский С.И., Корнелюк А.И.
Институт молекулярной биологии и генетики НАН Украины, г.Киев

Одынец К.А.
Каниболоцкий Д.С.
Скурский С.И.
Корнелюк А.И.
Институт молекулярной биологии и генетики НАН Украины

В данной работе представлен сравнительный анализ результатов моделирования молекулярной динамики во временном диапазоне до 4,5 нс модели пространственной структуры С-концевого модуля бычьей цитоплазматической тирозил-тРНК синтетазы (C-TyrRS, *Bos taurus*) и кристаллографической структуры высокогомологичного C-TyrRS человека. Обнаружено хорошее согласие между конформационной подвижностью в растворе для модели и экспериментальной структуры. Полученные результаты удовлетворительно согласуются со среднеквадратичными флуктуациями C_α-атомов C-TyrRS человека, рассчитанными из кристаллографических B-факторов. Показано, что наибольшей подвижностью в растворе обладает петля Val86-Lys92, которая принимает участие в связывании тРНК. Проанализировано поведение аминокислотных остатков Pro6-Ser18, которые предположительно отвечают за цитокин-подобную активность C-TyrRS. Обнаружено, что в процессе динамики происходит незначительное увеличение поверхности доступной растворителю остатков Pro6-Ser18.

Ключевые слова: тирозил-тРНК синтетаза, С-концевой модуль, моделирование по гомологии, молекулярная динамика, конформационная подвижность, цитокиновый мотив.