

DOI: 10.15643/vnpm-2023-44

## ОПИСАНИЕ МЕХАНИЗМА ИЗБИРАТЕЛЬНОЙ КАТАЛИТИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ АСПАРТАТНЫХ ПРОТЕАЗ

**Ильина М.Г.<sup>1</sup>, Борисевич С.С.<sup>1</sup>, Хамитов Э.М.<sup>1</sup>, Щербаков Д.Н.<sup>2</sup>**

<sup>1</sup>Уфимский институт химии УФИЦ РАН,

Уфа, Россия

<sup>2</sup>ФГБОУ ВО Алтайский государственный университет,

Барнаул, Россия

e-mail: [margarita.kondrova@yandex.ru](mailto:margarita.kondrova@yandex.ru)

Специфическая активность является главной биохимической характеристикой любого молокосвертывающего фермента, поскольку указывает на его способность гидролизовать чувствительную пептидную связь в молекуле κ-казеина и вызывать коагуляцию молока. Известен парадокс "химозин коровы - молоко верблюда", который заключается в неспособности коровьего химозина свертывать молоко верблюда, тогда как верблюжий фермент способен эффективно коагулировать молоко коровы. В рамках данной работы методами молекулярного моделирования оценили перекрёстную аффинность казеинов верблюда и коровы к химозинам тех же животных.

Для оценки аффинности κ-казеинов к химозину использовали протокол протеин-протеин докинга PIPER [1], основной алгоритм которого заключается во вращении лиганда (с изменением конформации при необходимости) относительно рецептора. Результатом расчета является оценка энергии взаимодействия между двумя белками.

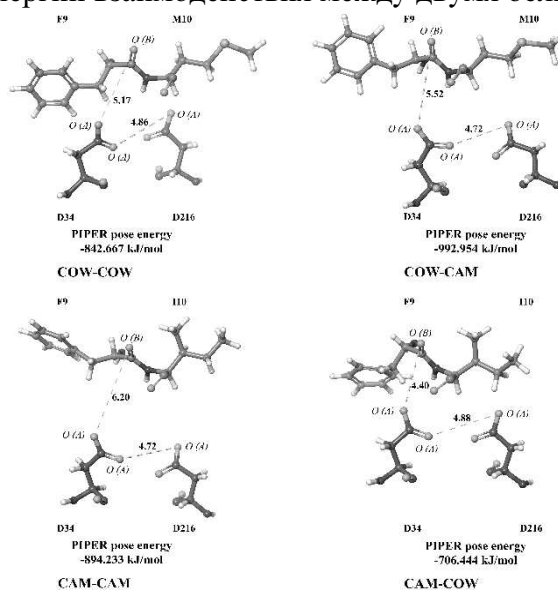


Рисунок 1. Расположение двух функциональных аминокислот κ-казеинов в непосредственной близости к аспартатам химозинов. Результаты процедуры молекулярного докинга.

Согласно результатам докинга наибольшая аффинность полипептидной цепочки, имитирующей κ-казеин коровы к активному сайту верблюда. Об этом свидетельствуют данные балла стыковки и энергетическая составляющая (рис. 1). Стоит отметить, что энергетическую составляющую нельзя рассматривать как энергию связывания пептида и белка. С другой стороны, параметры характеризующие аффинность полипептида, имитирующего κ-казеин верблюда к химозину коровы могут свидетельствовать о самом низком средстве полипептида к активному сайту.

### Литература

1. Kozakov D., Brenke R., Comeau S.R., Vajda S. // *Bioinformatics*. 2006. V. 65. №2. P. 392-406.