

## **ВЕБ-СЕРВЕР PLATINUM: АНАЛИЗ И ВИЗУАЛИЗАЦИЯ ГИДРОФОБНЫХ СВОЙСТВ БИОМОЛЕКУЛЯРНЫХ КОМПЛЕКСОВ**

**Пыркков Т.В.<sup>1</sup>, Чугунов А.О., Крылов Н.А.<sup>2</sup>, Нольде Д.Е., Ефремов Р.Г.**

Институт биоорганической химии им. академиков М.М.Шемякина и Ю.А.Овчинникова  
РАН

Россия, 117997, Москва, ул. Миклухо-Маклая, 16/10

Тел./факс: (495) 336-20-00

E-mail: pyrkov@nmr.ru

<sup>1</sup>Московский физико-технический институт  
Россия, 141700, г. Долгопрудный, Институтский пер., 9

<sup>2</sup>Межведомственный суперкомпьютерный центр РАН  
Россия, 119991, г. Москва, Ленинский проспект, 32А

Гидрофобный эффект играет важную роль в поддержании пространственной структуры и специфичном узнавании в биомолекулярных системах. Для количественной оценки величины гидрофобных межмолекулярных взаимодействий часто используют эмпирический метод молекулярного гидрофобного потенциала (МГП). Однако отсутствие доступного программного обеспечения, которое реализовало бы указанный подход, является заметным препятствием на пути его применения в биомолекулярных исследованиях.

Чтобы восполнить данный пробел, нами было разработано программное приложение PLATINUM (Protein-Ligand ATtractions Investigation NUMerically) и веб-интерфейс к нему. Данный веб-сервер позволяет на основе метода МГП визуализовать, а также численно характеризовать как гидрофобные/гидрофильные свойства отдельных органических молекул, так и их комплементарность в биомолекулярных комплексах, для которых имеется модель пространственной структуры (лиганд – белок, пептид – липидный бислой и т.п.).

Кроме того, предоставлен удобный интерфейс для анализа гидрофобных взаимодействий и ранжирования в соответствии с их величиной результатов молекулярного докинга – предсказания ориентации низкомолекулярных соединений – лигандов в активном центре рецептора. Для ранжирования результатов докинга в PLATINUM включены разработанные нами ранее критерии оценки межмолекулярных гидрофобных взаимодействий в комплексах белок-лиганд (Pyrkov et al., PROTEINS 66, pp. 388-398, 2007; Pyrkov et al., SAR QSAR Environ Res 19, pp. 91-99, 2008).

Работа выполнена при финансовой поддержке грантов РФФИ (06-04-49194-а, 07-04-01514-а), программы РАН «Молекулярная и клеточная биология» и гранта президента РФ № МК-125.2008.4.