

КОЛОНКА ГЛАВНОГО РЕДАКТОРА

DOI: 10.31857/S0023476123700327, EDN: XSEBLK

Уважаемые читатели!

Представляем вашему вниманию тематический выпуск, посвященный работам российских исследователей в области структурной биологии.

Структурная биология — междисциплинарная наука, изучающая биомолекулы на уровне трехмерных структур и их динамики. Объектами изучения являются белки, нуклеиновые кислоты, а также сложные макромолекулярные комплексы. Изучение структуры и ее динамических изменений позволяет понять детали механизма функционирования биологических молекул и использовать эти знания для разработки новых лекарственных средств и усовершенствования уже существующих, разработки экономически целесообразных биотехнологических цепочек. Структурная биология включает в себя экспериментальные и вычислительные методы, а также использует результаты комплементарных биофизических и биохимических методов для интерпретации структурных данных.

Рентгеноструктурный анализ макромолекул, для реализации которого необходимо получить кристаллы, является основным методом структурной биологии. В России это направление зародилось в конце 1950-х гг., его лидером и вдохновителем был академик Б.К. Вайнштейн, создавший лабораторию белковой кристаллографии в Институте кристаллографии РАН (сейчас ФНИЦ “Кристаллография и фотоника” РАН, присоединенный в 2023 г. к Курчатовскому институту). В лаборатории Вайнштейна было выполнено большое количество работ мирового уровня, внесших серьезный вклад в исследования разных классов белков, а также методов кристаллизации и развития программного обеспечения для белковой кристаллографии.

В настоящем тематическом сборнике представлен ряд работ, посвященных кристаллическим структурам ДНК-связывающих белков, токсина из змеиного яда, тиоцианатдегидрогеназы, гипоксантин-гуанин фосфорибозилтрансферазы, трансаминазы (Леконцева и др.; Шилова и др.; Сафонова и др. и пр.). В работах для решения и уточнения кристаллических структур использованы широко востребованные во всем мире программы: молекулярного замещения (Molrep) и уточнения (Refmac). Одним из разработчиков этих программ являлся бывший сотрудник лабо-

ратории белковой кристаллографии Института кристаллографии РАН А. Вагин, которого не стало в марте этого года.

Ключевым компонентом успеха метода является получение высококачественных кристаллов исследуемых объектов. В сборнике часть статей посвящена использованию вариаций методов кристаллизации белков, в том числе в условиях микрогравитации (в рамках программы Роскосмоса по кристаллизации белков на русском сегменте международной космической станции), влиянию метода получения кристаллов на кристаллическую упаковку (Дубова и др.), подходам к улучшению дифракционного качества кристаллов (Сафонова и др.; Абрамчик и др.) и использованию молекулярной динамики для исследования процессов роста белковых кристаллов (Ивановский и др.).

Отдельно можно выделить ряд работ по структурной вирусологии и вакцинологии: рентгеноструктурный анализ рецепторсвязывающего домена SARS-CoV-2 с нейтрализующим антителом (Бойко и др.), кристаллизации пикорнаина 3С (Тишин и др.), обзор работ по взаимодействию протонного М2-канала вируса гриппа А с противовирусными лекарственными препаратами (Лашков и др.), ряд новаторских работ по биоинформационному анализу потенциальных эпитопов вирусных белков (И.А. Колесников и др.).

Представлены работы по развитию методов обработки данных малоуглового рентгеновского рассеяния (МУРР) (Конарев и др.; Волков), а также экспериментальные результаты МУРР, позволившие получить важную структурную информацию об исследуемых объектах. В сборник вошли статьи по использованию электронной микроскопии для исследования структур биологических объектов (Бурцева и др.). Метод является быстроразвивающимся и перспективным как для предварительной характеристики образцов, так и для получения структур высокого разрешения. Выполнение данных работ стало возможно благодаря уникальному оборудованию ресурсного центра “Нанозонд” Курчатовского института, в частности современному криоэлектронному микроскопу Titan Krios, не имеющему аналогов в России.

Методами двумерной дифракции и рентгеновской рефлектометрии изучены молекулярные ме-

ханизмы взаимодействия противоопухолевого антибиотика доксорубицина с липидными моделями клеточных мембран (Новикова и др.).

Практически во всех работах по рентгеноструктурному анализу, экспериментальным работам по МУРР, рентгеновской дифракции и рефлексомерии высокие результаты удалось получить благодаря синхротронному излучению, что подчеркивает важность “Федеральной научно-технической программы развития синхротронных и нейтронных исследований и исследовательской инфраструктуры на 2019–2027 годы”, в рамках которой получен ряд представленных в сборнике результатов.

Выпуск дает общее представление о направлениях работ по структурной биологии различных исследовательских групп в России, о методах, используемых в данной области, о потенциале этой междисциплинарной науки, и могут быть интересны как структурным биологам, так и ученым, работающим в смежных областях.

*Главный редактор, член-корреспондент РАН
профессор М.В. Ковальчук,*

*Приглашенные редакторы
академик РАН, доктор химических наук В.О. Попов,
кандидат физико-математических наук В.Р. Самыгина*