

КОЛОНКА ГЛАВНОГО РЕДАКТОРА

DOI: 10.31857/S002347612105009X

Вниманию читателей представлен тематический выпуск, посвященный работам российских исследователей в области структурной биологии.

Структурная биология – междисциплинарная наука на стыке физики, математики, молекулярной биологии, биохимии, биофизики, изучающая трехмерные структуры отдельных биомолекул (в первую очередь белков) и сложных молекулярных машин. Знание структуры и ее динамических изменений позволяет детально изучить аспекты функционирования биомолекул и использовать эти знания для разработки лекарств, создания и совершенствования биотехнологических цепочек. Современная структурная биология располагает целым арсеналом методов, которые используются в зависимости от объектов. Рентгеноструктурный анализ белков (или белковая кристаллография), зародившийся в 50-х годах прошлого века, до сих пор является основным методом. Пионером белковой кристаллографии в России был Б.К. Вайнштейн, создавший в 1958 г. лабораторию белковой кристаллографии в Институте кристаллографии РАН (сейчас ФНИЦ “Кристаллография и фотоника” РАН). Работы этой лаборатории, выполненные на мировом уровне, внесли весомый вклад в развитие направления в целом. Доля биологических структур, полученных рентгеноструктурным анализом, на настоящий момент составляет более 80%. Ключевым компонентом успеха метода является получение высококачественных кристаллов исследуемых объектов. В сборнике большая часть обзоров и статей посвящена рентгеноструктурному анализу белков, в том числе исследованию процессов кристаллизации и применению специальных техник кристаллизации. Статья Эйстрих-Геллер и др. демонстрирует, как использование микрогравитации помогает получить кристаллы, рассеивающие до атомного разрешения (1.06 \AA) для белка уридинфосфорилазы. Работа выполнена в рамках программы ЦНИИМашРоскосмоса по кристаллизации белков на Российском сегменте МКС в рамках Федеральной космической программы России. ФНИЦ “Кристаллография и фотоника” РАН (ранее Институт кристаллографии РАН) является постановщиком этих экспериментов с 2005 г. Структура такого высокого разрешения позволила увидеть детали строения, которые не были известны для этого белка ранее. Такой ре-

зультат оказался возможен, в том числе, благодаря использованию синхротронного излучения. В вошедших в сборник статьях по белковой кристаллографии результаты получены с использованием синхротронов. Такие работы традиционно ведутся в ФНИЦ “Кристаллография и фотоника” РАН, Курчатовском институте, а также институтах Российской академии наук ФИЦ “Фундаментальные основы биотехнологии”, Институте белка и Институте молекулярной биологии. Принятая в Российской Федерации “Федеральная научно-техническая программа развития синхротронных и нейтронных исследований и исследовательской инфраструктуры на 2019–2027 годы” подчеркивает важность развития этих работ.

В статьях Эйстрих-Геллер и др., Метелешко и др. продемонстрировано применение математического моделирования для анализа кристаллических структур. Отдельная статья посвящена разработке утилиты к программе молекулярной графики *ruMol* для анализа взаимодействия лиганда с белком в кристаллических структурах.

Ядерно-магнитный резонанс (ЯМР) позволяет определить структуру белков с молекулярной массой до ~ 100 кДа в растворе с высокой точностью. Использование ЯМР в ряде работ по получению структур белков, играющих роль в возникновении болезни Альцгеймера, продемонстрировано в обзоре Урбана и др. В обзоре показаны преимущества ЯМР для исследования строения неструктурированных белков и выигрешность использования нескольких структурных методов для исследования сложных биологических объектов и процессов. Другой бурно развивающийся метод – криоэлектронная микроскопия (криоЭМ) – позволяет определять структуры макромолекул и макромолекулярных комплексов большого размера также без получения кристаллов. Достижения этого метода представлены в обзоре Качер и др. и проиллюстрированы в статьях Паниной и др., Пичкур и др. (работы выполнены совместно МГУ и Курчатовским институтом). Ограничения по размеру исследуемых объектов постоянно смещаются в сторону менее крупных образцов. Метод криоЭМ занял свое место в ряде методов структурной биологии высокого разрешения с 2013 г. с появлением новых сверхбыстрых детекторов и имеет блестящие перспективы.

Еще одним методом, активно используемым в исследовании структур биологических объектов, является малоугловое рентгеновское рассеяние (МУРР). Этот метод, позволяющий определять структуры низкого разрешения в растворе при физиологических условиях, отличается простотой эксперимента и имеет широкие границы применимости. Статьи сотрудников ФНИЦ “Кристаллография и фотоника” РАН и Курчатовского института демонстрируют его возможности в сочетании с использованием синхротронного излучения. Оно позволяет исследовать образцы более низких концентраций и получать данные более высокого качества. В работе М.А. Марченковой и др., направленной на изучение процесса образования белковых кристаллов, метод МУРР был применен для изучения олигомерного состава кристаллизационных растворов лизоцима в зависимости от типа осадителя. Пред-

ставлены также статьи по развитию методов анализа малоугловых экспериментальных данных.

Выпуск дает общее представление о широте спектра работ в области структурной биологии, которые ведутся в настоящий момент в России, о возможностях и перспективах этой междисциплинарной науки и могут быть интересны как структурным биологам, так и ученым, работающим в смежных областях.

*Главный редактор журнала “Кристаллография”
член-корреспондент РАН
Профессор М.В. Ковальчук*

*Приглашенный редактор академик РАН,
доктор химических наук В.О. Попов*

*Приглашенный редактор
кандидат физико-математических наук
В.Р. Самыгина*