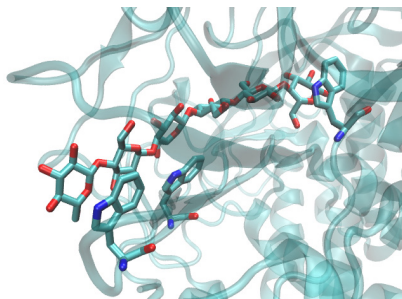


ИНТЕРАКЦИЈЕ ИЗМЕЂУ УГЉЕНИХ ХИДРАТА И АРОМАТИЧНИХ АМИНОКИСЕЛИНА: КРИСТАЛОГРАФСКА ПРЕТРАГА

И. М. Станковић^а, Ј. П. Благојевић Филиповић^б, С. Д. Зарић^в

^а *Институт за Хемију, Технологију и Металургију, Универзитет у Београду, Његошева 12, 11000 Београд, Србија;* ^б *Иновациони центар Хемијског факултета, Универзитет у Београду, Студентски трг 12-16, 11000 Београд, Србија;* ^в *Хемијски факултет, Универзитет у Београду, Студентски трг 12-16, 11000 Београд, Србија*
e-mail: szaric@hem.bg.ac.rs

Код различитих ензима активних на угљеним хидратима, клизајући, паралелни стекинг између моносахаридне јединице и аминокиселине протеина је важан за препознавање супстрата и феномен процесивности [1]. Поред хидрофобног ефекта, они интерагују путем неконвенционалних водоничних веза: С-Н/ π интеракција [2]. Ниједна од ових интеракција није посебно усмерена, омогућавајући клизајући карактер. Овде смо систематски анализирали геометрије ароматично/сахаридних контаката нађених у кристалографским структурама у Протеинској Банци Података. Критеријум за С-Н/ π интеракције је био исти као у [3]. Скрипте и програми за претрагу су написани у језику *Python* са коришћењем библиотеке *MDAnalysis* [4] за читање *PDB* датотека. Показали смо да само



Слика 1. Пример шесточланог супстрата који интерагује са три ароматичне аминокиселине у тунелу ензима. PDB id: 1L2A.

ароматично/сахаридни контакти са С-Н/ π интеракцијама имају претежно паралелни и клизајући карактер у равни паралелној са ароматичним прстеном (Слика 1). Геометрије нису специфичне у равни паралелној са ароматичним прстеном, само показују тежњу ка нормалним растојањима између прстенова око 4 Å, док су хоризонтална померања у опсегу 0-2 Å. Анализа образаца ензим/супстрат показала је да свака друга или трећа јединица супстрата код других сахараида интерагује са ароматичном аминокиселином ензима (Слика 1).

- [1] H. Zhang, J. Zhang, L. Sun, X. Niu, S. Wang and Y. Shan, *J. Mol. Recognit.*, **27** (2014) 438–447.
- [2] E. Jiménez-Moreno, G. Jiménez-Osés, A. M. Gómez, A. G. Santana, F. Corzana, A. Bastida, J. Jiménez-Barbero and J. L. Asensio, *Chem. Sci.*, **6** (2015) 6076.
- [3] K. L. Hudson, et al. *Journal of the American Chemical Society*, **137** (2015) 15152–60.
- [4] N. Michaud-Agrawal, E. J. Denning, T. B. Woolf, O. J. Beckstein, *Comput. Chem.* **32** (2011) 2319–2327.

INTERACTIONS BETWEEN CARBOHYDRATES AND AROMATIC AMINO ACIDS: A CRYSTALLOGRAPHIC SURVEY

I. M. Stanković^a, J. P. Blagojević Filipović^b, S. D. Zarić^c

^a University of Belgrade, Institute of Chemistry, Technology and Metallurgy, Njegoševa 12, 11000 Belgrade, Serbia; ^b Innovation center, Faculty of Chemistry, Studentski trg 12-16, Belgrade, Serbia; ^c Faculty of Chemistry, University of Belgrade, Studentski trg 12-16, 11000 Belgrade, Serbia
e-mail: szaric@hem.bg.ac.rs

In different carbohydrate active enzymes, the sliding, parallel stacking between a monosaccharide unit and a protein aromatic ring is important for substrate recognition and processivity [1]. Along with the hydrophobic effect, they interact by nonconventional hydrogen bonds: the C-H/ π interactions [2]. Neither of these interactions is highly directional, therefore enable sliding.

Here, we systematically analyze geometry of monosaccharide/aromatic amino acid contacts found in X-ray crystallography structures, in the Protein Data Bank. The criteria for the C-H/ π interaction are the same as in [3]. Homemade scripts for the search were written in Python with the MDAnalysis [4] python library for protein file parsing.

We showed that only the carbohydrate/aromatic contacts with C-H/ π interactions are preferentially parallel and of sliding character in the plane parallel to aromatic ring (Figure 1).

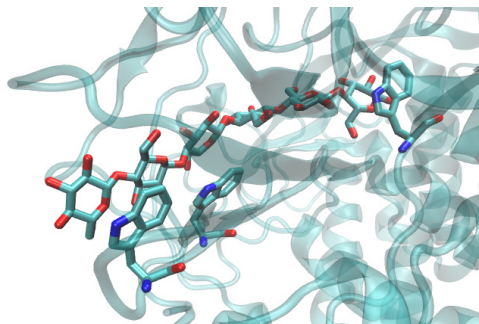


Figure 1. An example of a six units long carbohydrate substrate interacting with three aromatic amino acids in the protein cleft. PDB id: 1L2A.

The geometries are not specific in the plane parallel to the aromatic ring, they only show tendency for the normal distance between rings of around 4 Å, while horizontal displacement are in the range of 0-2 Å.

The analysis of enzyme-substrate patterns showed that every second or third carbohydrate unit in long substrates stacks with enzyme aromatic amino acids (Figure 1).

- [1] H. Zhang, J. Zhang, L. Sun, X. Niu, S. Wang and Y. Shan, *J. Mol. Recognit.*, **27** (2014) 438–447.
- [2] E. Jiménez-Moreno, G. Jiménez-Osés, A. M. Gómez, A. G. Santana, F. Corzana, A. Bastida, J. Jiménez-Barbero and J. L. Asensio, *Chem. Sci.*, **6** (2015) 6076.
- [3] K. L. Hudson, et al. *Journal of the American Chemical Society*, **137** (2015) 15152–60.
- [4] N. Michaud-Agrawal, E. J. Denning, T. B. Woolf, O. J. Beckstein, *Comput. Chem.* **32** (2011) 2319–2327.