Informatics in Biology, Health, and Food

Interdisciplinary Explorations in Life Science

Volume 2. Number 2. Dec. 2025 DOI: 10.22034/ibhf.2025.542778.1034

Original Article

Modeling the 3D Structure of RecA Protein Isolated from *Deinococcus gobiensis* I-O

Nazanin Ataee[1]*, Mahboubeh Derakhshani[1], Farnaz Fakhr[2]

[1] Department of Biology, Kavian Institute of Higher Education, Mashhad, Iran

[2] Department of Computer Engineering, Sajjad University, Mashhad, Iran

Received: 2025/08/22 **Accepted:** 2025/10/08 **Online Published:** 2025/10/22

Abstract

Double-stranded DNA breaks (DSB) are one of the most destructive damages caused by ionizing radiation to cells. Resistance to harsh conditions of ionizing radiation, UV light, and dryness are special characteristics of members of the genus Deinococcus. In order to maintain survival against radiation-induced damage, the bacterium Deinococcus gobensis (strain I-O) has the RecA protein (Recombinase A), which plays a pivotal role in the repair of DSB and recombination. In this study, the three-dimensional structure of the RecA protein isolated from Deinococcus gobensis strain I-O, which has not been determined experimentally, was simulated by aligning it with the sequence of Deinococcus radiodurans using the Swiss model program. The alignment result showed that the RecA protein is 80% similar to the human gene. In order to examine the quality of modeling, the Root Mean Square (RMS) was calculated, in the aforementioned model was estimated to be 0.56 angstroms, which was less than 1 and indicated the suitability of the designed model. By predicting and determining three-dimensional structures and modeling proteins, interactions between substrates can be examined and, with the help of bioinformatics, a tool for great success in the field of drug design can be obtained in this field.

Keywords: *Deinococcus gobiensis*, *Deinococcus radiodurans*, RecA, Swiss model.

Cite this article: Ataee N., Derakhshani M., Fakhr F. Modeling the 3D structure of RecA protein isolated from the bacterium *Deinococcus gobiensis* I-O. *Informatics in Biology, Health, and Food*. 2025;2(2):25-34

Copyright©: The Authors. Published by Shandiz Institute of Higher Education

Corresponding author: Nazanin Ataee **Email**: ataee1357@yahoo.com

انفورماتیک در زیست‌شناسی، بهداشت و غذا

کاوش‌های بین رشته‌ای در علوم زیستی

دوره ۲. شماره ۲. آذر ۱۴۰۴ DOI: 10.22034/ibhf.2025.542778.1034

مقاله پژوهشی

مدل‌سازی ساختار سه‌بعدی پروتئین Rec A جدا شده از باکتری *Deinococcus gobiensis* I-O

دکتر نازنین عطایی[1*]، محبوبه درخشانی[1]، فرناز فخر[2]

[1] گروه زیست شناسی، موسسه آموزش عالی کاویان، ایران، مشهد

[2] گروه مهندسی کامپیوتر، دانشکده کامپیوتر، دانشگاه سجاد، ایران، مشهد، ایران

دریافت: ۱۴۰۴/۵/۳۱ **پذیرش:** ۱۴۰۴/۷/۱۶ **انتشار آنلاین:** ۱۴۰۴/۷/۳۰

چکیده

شکست‌های DNA دو رشته‌ای (DSB) از مخرب‌ترین آسیب‌های ناشی از تشعشعات یونیزه‌کننده به سلول است. مقاومت نسبت به شرایط سخت تشعشعات یونیزه‌کننده، نور UV و خشکی از ویژگی‌های خاص اعضاء جنس *دینوکوکوس* می‌باشد. به منظور حفظ بقا در برابر آسیب‌های ناشی از تشعشعات، باکتری *دینوکوکوس گوبینسیس* سویه I-O دارای پروتئین RecA است که این پروتئین نقش محوری در ترمیم DSB و نوترکیبی دارد. در این پژوهش، ساختار سه بعدی پروتئین RecA جدا شده از *دینوکوکوس گوبینسیس* سویه I-O که به روش تجربی تعیین ساختار نشده است، به کمک همترازی با توالی *دینوکوکوس رادیودورانس* توسط برنامه Swiss model شبیه سازی گردید. نتیجه همترازی صورت گرفته نشان داد که پروتئین RecA در مقایسه با ژن انسانی ۸۰ درصد مشابهت دارد. به جهت بررسی کیفیت مدل‌سازی، میزان میانگین مربع محاسبه شده در مدل مذکور ۰/۵۶ آنگستروم برآورد شد که این مقدار کمتر از ۱ بود و نشان دهنده مناسب بودن مدل طراحی شده است. با پیش‌بینی و تعیین ساختارهای سه بعدی و مدل‌سازی پروتئین‌ها می‌توان برهمکنش‌های بین سوبستراها را بررسی کرد و با کمک علم بیوانفورماتیک، در زمینه طراحی داروها ابزاری به موفقیت‌های بزرگی در این حوزه کسب کرد.

کلمات کلیدی: *دینوکوکوس گوبینسیس*، *دینوکوکوس رادیودورانس*، RecA، Swiss model

Cite this article: Ataee N., Derakhshani M., Fakhr F. Modeling the 3D structure of RecA protein isolated from the bacterium *Deinococcus gobiensis* I-O. *Informatics in Biology, Health, and Food*. 2025;2(2):25-34.

Copyright©: The Authors. Published by Shandiz Institute of Higher Education

Corresponding author: Nazanin Ataee **Email**: ataee1357@yahoo.com

مقدمه

تشعشعات یونیزه‌کننده به دلیل تولید رادیکال‌های آزاد موجب آسیب به پروتئین‌ها، غشاها و DNA سلولی می‌شود که این آسیب‌ها عامل مرگ بسیاری از ارگانیسم‌ها می‌باشد. مرگ‌آورترین نوع این آسیب‌ها تولید شکست‌هایی در DNA دو رشته‌ای است (DSB) (۱). مطالعه بر روی باکتری‌های جنس *دینوکوکوس*[1] نشان داده که مقاومت نسبت به تشعشعات یونیزه‌کننده، اشعه فرا بنفش (UV) و خشکی از ویژگی‌های خاص این جنس می‌باشد (۲). باکتری‌های این جنس در برابر تشعشعات یونیزه‌کننده و اشعه فرابنفش به ترتیب ۲۰۰ و ۲۰ برابر مقاومت بیشتری را نسبت به باکتری *اشرشیا کلای* نشان می‌دهد (۳).

اعضاء جنس *دینوکوکوس* از محیط‌های مختلفی مانند خاک‌های بیابانی، محیط‌های آبی، ریزوسفر گیاهان، چشمه‌های آب داغ و گرد و غبار جدا شده‌اند (۴). اخیرا یک گونه باکتریایی *دینوکوکوس گوبینسیس* سویه I-O از نواحی فوقانی سطوح شنی در بیابان سرد Gobi واقع در ناحیه Xinjiang چین جدا شده که این سویه نسبت به سایر سویه‌های شناخته شده *دینوکوکوس*‌ها مقاومت بالایی به تشعشعات گاما و نور فرابنفش دارد. ژنوم *دینوکوکوس گوبینسیس* بزرگتر از سایر گونه‌های *دینوکوکوس* می‌باشد که احتمالا این ژن‌ها را از طریق انتقال افقی بدست آورده‌است. ژنوم این سویه ترکیبی از ۷ رپلیکون شامل یک کروموزوم اصلی ۳/۱ میلیون جفت باز و ۶ پلاسمید از ۵۳ تا ۴۳۳ کیلو جفت بازمی‌باشد. آنالیزهای فیلوژنتیک نشان داد که *دینوکوکوس گوبینسیس* بیشتر به *دینوکوکوس رادیودورانس* نزدیک است. از جمله دلایل مختلفی که برای این مقاومت بالا ذکر شده می‌توان به بیان آنزیم‌ها و پروتئین‌های مختلف مانند کاتالاز، سوپراکسید دسموتاز و پروتئین‌های Oxy R و Lys R، تولید کاروتنوئیدها، تجمع منگنز درون‌سلولی و داشتن سیستم ترمیم قوی اشاره کرد (۳).

دینوکوکوس گوبینسیس دارای یکسری ژن‌های کدکننده پروتئین برای مسیرهای مختلف ترمیم DNA می‌باشد. پروتئینRecA در ترمیم و نوترکیبی و ایجاد فنوتیپ مقاومت *دینوکوکوس* نقش محوری دارد (۴). RecA، پلی‌پپتید ۳۸ کیلودالتونی است که بیش از یک مکان اتصال به DNA دارد. RecA پروتئین چند عملکردی است که سه پروسه بیولوژیکی مرتبط را شامل نوترکیبی، ترمیم و پاسخ SOS را کاتالیز می‌کند. این پروتئین می‌تواند به DNA تک‌رشته‌ای و دورشته‌ای متصل شود. به‌منظور اتصال RecA با دورشته DNA کوفاکتور نوکلئوتیدی (ATP یا dATP) مورد نیاز است. در حضور ATP پروتئین RecA تشکیل هلیکس رشته‌ای نوکلئوپروتئینی می‌دهد (۵). این پروتئین یا پروتئین‌های مشابه آن در باکتری‌ها، آرکی‌ها، مخمر، گیاهان و پستانداران یافت شده است. نقش اصلی این پروتئین حفظ پیوستگی DNA از طریق ترمیم و نوترکیبی می‌باشد. توقف عمل RecA در باکتری‌های جنس *دینوکوکوس* موجب کاهش شدید توانایی این باکتری‌ها در بازسازی آسیب‌های DNA می‌شود و مانع رشد آن در حضور تشعشعات می‌گردد (۶). ژن‌های *RecA* در *دینوکوکوس* به‌طور ترجیحی به DNA دو رشته‌ای متصل می‌گردد و این نشان می‌دهد که توانایی RecA *دینوکوکوس* در ترمیم آسیب‌های وارده به DNA دو رشته‌ای منحصر به فرد است. مقدار RecA در *دینوکوکوس* به‌طور نرمال پایین است و زمانی‌که در معرض استرس‌های شدید قرار می‌گیرد مقدار زیادی از این پروتئین بیان می‌شود (۷). زمانی‌که DSB زیادی (حدود ۱۰۰ مورد) در دو رشته DNA به وجود آید، *دینوکوکوس* قادر به بازسازی ژنوم خود به طور کامل می‌باشد درحالی‌که *اشرشیا کلای* در مقایسه با آن می‌تواند تنها ۲ تا ۳ DSB را تحمل کند (۸).

در این پژوهش از ساختار تعیین شده‌ی پروتئین RecA در *دینوکوکوس رادیودورانس* به عنوان الگوی مدل برای پیش‌بینی و تعیین ساختار سه بعدی پروتئین RecA در *دینوکوکوس گوبینسیس* سویه I-O استفاده شد. همچنین از برنامه Alignment mode و برنامه Swiss-model و نرم افزار Swiss-PDB viewer ساختار سه بعدی پروتئین مورد نظر، مدل‌سازی صورت گرفت.

روش‌ها

با توجه به هدف پژوهش، جهت پیش‌بینی و تعیین ساختار سه بعدی پروتئین RecA در باکتری *دینوکوکوس گوبینسیس*، قسمت‌های متفاوت توالی پروتئین RecA در باکتری *دینوکوکوس رادیودورانس* که تعیین ساختار و تعیین توالی شده است، به عنوان الگوی مدل‌سازی انتخاب گردید و مشخصات ژنی پروتئین هدف، توالی اسیدهای آمینه و دیگر ویژگی‌های آن از بانک‌های اطلاعاتی NCBI و Uniprot استخراج گردید، همچنین جهت مشاهده ساختارهای پروتئین از سایت Uniprot نیز استفاده شد (۱۱،۱۰).

در این مطالعه از پروتئین RecA باکتری *دینوکوکوس گوبینسیس* سویه I-O، که تعیین توالی شده اما تعیین ساختار نشده است، جهت مدل‌سازی استفاده گردید. این ژن با شماره‌ی

[1] *Deinococcus*

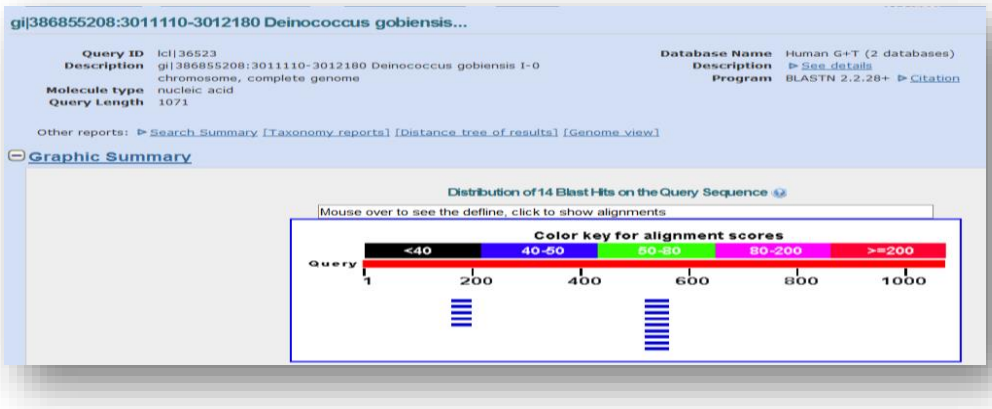
شناسایی ۳۸۶۸۵۵۲۰۸ در جایگاه توالی NC_017790.1 در NCBI مشخص شده است. با استفاده از برنامه‌های PFAM و Inter pro، خانواده، کلاس و دومین‌های پروتئین مورد بررسی قرارگرفت و برای تعیین توالی‌های عملکردی از سایت Pro site استفاده شد (۱۴-۱۲). جهت همترازی و یافتن توالی مشابه با ژن *RecA* (ژن‌های انسانی با بیش از ۵۰ درصد شباهت)، فرمت FASTA ژن *RecA* از برنامه Blastp و Blastn در بانک اطلاعاتی NCBI گرفته شد (۱۱). جهت پیدا کردن پرایمر مناسب از برنامه Primer 3 به صورت online استفاده شد (۱۵). پروتئین الگو برای مدل‌سازی پروتئین RecA باید کد PDB (Protein Data Bank) داشته باشد. بدین صورت از بانک اطلاعاتی پروتئین PDB استفاده گردید (۱۶). به منظور جستجوی پروتئین‌های دارای تشابه ساختاری با پروتئین هدف از سایت Hssp استفاده گردید (۱۷). جهت صحت در انتخاب الگوی مناسب، از سایت Swiss-model که به صورت خودکار الگو را جستجو می‌کند، استفاده شد. طراحی ساختار سه بعدی با استفاده از برنامه‌ی Alignment mode و Swiss- model انجام گرفت و توالی ژن هدف، پروتئین الگو و اطلاعات موجود در فایل PDB ژن *RecA* باکتری *دینوکوکوس گوبینسیس* وارد شد و مدل پیشنهادی توسط Swiss- model ارائه شد (۱۸). ساختار سه بعدی پروتئین در نرم افزار Swiss PDB Viewer بررسی شد و پارامترهای مختلف برای تغییر در عملکرد پروتئین مورد بررسی قرارگرفت. به منظور اطمینان از آزمون مدل‌سازی، برنامه SPDBV_4.04_PC مورد استفاده قرار گرفت (۱۹). در نهایت از برنامه Mega 5 به روش Neighbor joining با استفاده از boot strap 1000 برای رسم درخت فیلوژنی استفاده شد.

نتایج

جهت بررسی مشخصات ژن کدکننده پروتئین RecA، جدا شده از *دینوکوکوس گوبینسیس* سویه I-O، از بانک اطلاعاتی NCBI استفاده شد. این ژن با شماره‌ی شناسایی ۳۸۶۸۵۵۲۰۸ در جایگاه توالی NC_017790.1 در NCBI مشخص شده است. ژن مورد نظر دارای ۱۰۷۱ جفت باز می‌باشد که در فاصله‌ی بین بازهای ۳۰۱۱۱۱۰ تا ۳۰۱۲۱۸۰ از ژنوم قرار گرفته است. ژن‌های Dihydroorotase- related cyclic amidohydrolase (allB)، CinA- like protein (DGo-CA2831) و 2',5'RNA ligase (DGo-CA2832) در سمت چپ و ژن‌های Bio Y protein (Y Biofunctional Bir A biotin operon repressor/biotin (bir A) acetyl CoA carboxylase ligase و Furric uptake regulator، Fur family (fur) در سمت راست قرار دارند که یک قطعه بزرگ ژنی از فاصله ۳۰۰۷۵۷۸ تا ۳۰۱۴۴۲۶ را می‌سازد. در بررسی نواحی ژنومی، نسخه‌ها و محصولات ژنی *RecA* (به طول ۳۲۵ باز و در موقعیت فاصله‌ای ۱۷ تا ۳۴۱)، ناحیه Polypeptide (binding واسط هگزامر (اتصال پلی‌پپتید)به طول ۳۰۰ باز و در موقعیت فاصله‌ای ۲۵ تا ۳۲۴، محل اتصال ATP (اتصال شیمیایی) (به طول ۱۹۹ باز و در موقعیت فاصله‌ای ۸۰ تا ۲۷۸) و موتیف‌های Walker A و Walker B به ترتیب با طول ۸ باز و در موقعیت‌های فاصله‌ای ۷۸ تا ۸۵ و با طول ۵ باز در موقعیت‌های ۱۵۲ تا ۱۵۶ می‌باشد. دومین‌های پروتئین RecA در *دینوکوکوس گوبینسیس* سویه I-O. این پروتئین شامل P-loop دارای فعالیت نوکلئوزید تری‌فسفات هیدرولاز، ساختار اتصال‌دهنده‌ی ATP، ساختار ATPase، تداخل مونومر و ساختار انتهای C می‌باشد.

با استفاده از روش همترازی، شباهت بین ژن‌های انسانی و ژن *RecA* در *دینوکوکوس گوبینسیس* سویه I-O، که دارای حداقل ۵۰ درصد شباهت با ژن مورد مطالعه باشند، با استفاده از فرمت FASTA ژن مورد نظر و برنامه BLASTn و با انتخاب گزینه انسانی نشان داده شد (شکل ۱). نتیجه همترازی صورت گرفته نشان داد که ژن *RecA* در مقایسه با ژن انسانی Homo sapiens alternate assembly، ۸۰ درصد شباهت را نشان داد.

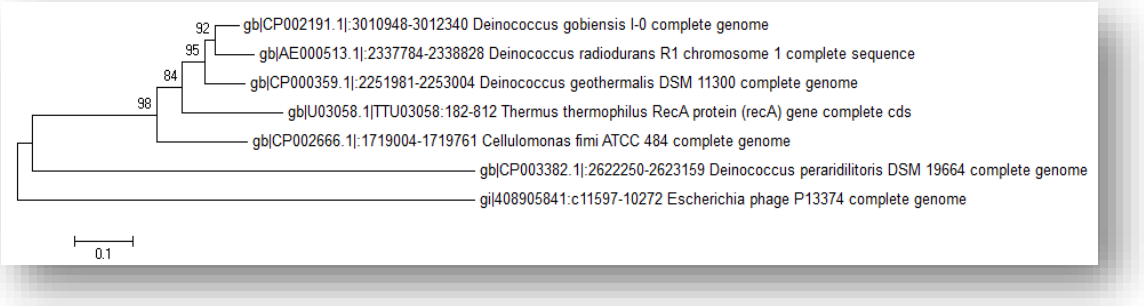
فیلوژنی مطالعه پیشرفت تکاملی گروه‌های ارگانیسمی است. الگوی انشعاب در یک درخت فیلوژنیک نشان دهنده چگونگی تکامل گونه‌ها یا گروه‌های مختلف از یک سری اجداد مشترک است. درخت فیلوژنی برای پروتئین‌های RecA در باکتری‌های *Deinococcus geothermalis*، *Deinococcus radiodurans* R1 DSM 11300، *Thermus thermophilis*، *Cellulomonas funi* ATCC 484، *Deinococcus peraridilitoris* DSM 19664 و *Escherichia* phage P13374 رسم شد (شکل ۲). درخت فیلوژنی مذکور نشان می‌دهد که *Deinococcus radiodurans* R1، *Deinococcus geothermalis* DSM 11300، *Thermus thermophilis*، *Cellulomonas funi* ATCC 484 دارای ارتباط فیلوژنیک نزدیک‌تری هستند اما *Deinococcus peraridilitoris* DSM 19664 و *Escherichia* phage P13374 شباهت کمتری دارند و مسیر تکاملی طولانی‌تری را طی کرده‌اند.



Description	Max score	Total score	Query cover	E value	Ident	Accession
Transcripts						
Homo sapiens secreted frizzled-related protein 4 (SFRP4), mRNA	41.0	41.0	3%	4.4	86%	NM_003014.3
PREDICTED: Homo sapiens phosphatidylethanolamine N-methyltransferase (PEMT), trans	41.0	41.0	4%	4.4	80%	XM_005256410.1
Homo sapiens phosphatidylethanolamine N-methyltransferase (PEMT), transcript variant 5,	41.0	41.0	4%	4.4	80%	NM_001267552.1
Homo sapiens phosphatidylethanolamine N-methyltransferase (PEMT), transcript variant 4,	41.0	41.0	4%	4.4	80%	NM_001267551.1
Homo sapiens phosphatidylethanolamine N-methyltransferase (PEMT), transcript variant 1,	41.0	41.0	4%	4.4	80%	NM_148172.2
Homo sapiens phosphatidylethanolamine N-methyltransferase (PEMT), transcript variant 2,	41.0	41.0	4%	4.4	80%	NM_007169.2
Homo sapiens phosphatidylethanolamine N-methyltransferase (PEMT), transcript variant 3,	41.0	41.0	4%	4.4	80%	NM_148173.1

شکل ۱. همترازی انجام شده برای ژن‌هایی با منشاء انسانی دارای شباهت بیش از ۵۰ درصد با ژن شباهت با RecA.

Figure 1. Alignment was performed for human-origin genes that share more than 50% similarity with the RecA-like.



شکل ۲. درخت فیلوژنی برای پروتئین RecA.

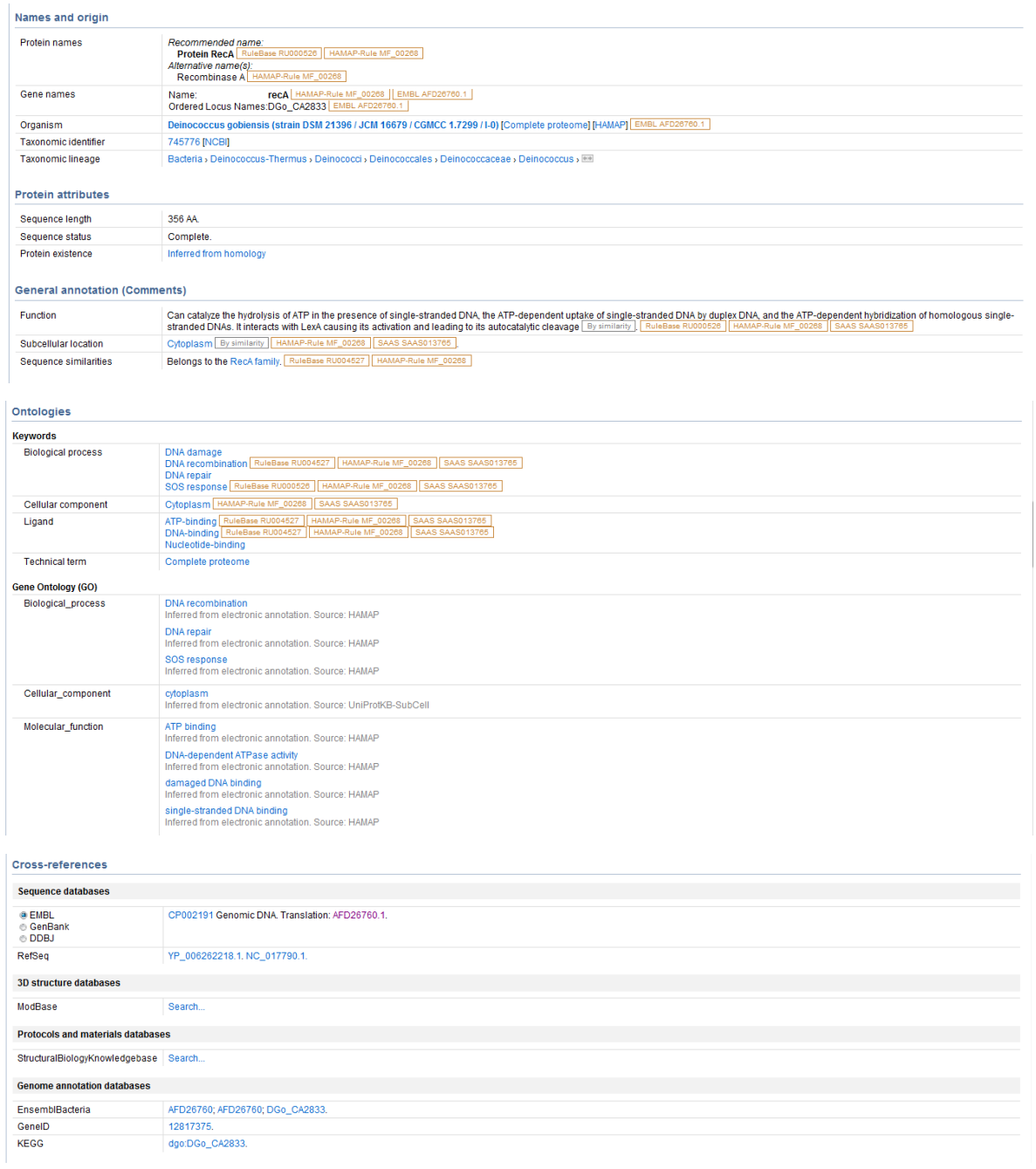
Figure 2. Phylogentic tree of RecA protein.

آنالیزهای فیلوژنتیک نشان داد که *دینوکوکوس گوبینسیس* نزدیک به *دینوکوکوس رادیودورانس* است، بنابراین به نظر می‌رسد پروتئین انتخابی الگوی مناسبی باشد. ساختمان اولیه پروتئین را توالی اسیدهای آمینه تشکیل دهنده آن تعیین می‌کند. توالی پروتئین الگو ۳۶۳ اسیدآمینه‌ای تعیین شده است. ساختمان دوم و سوم پروتئین به وسیله برهمکنش‌های ضعیف و متقابل بین گروه‌های جانبی مختلف شکل می‌گیرد. ساختار ثانویه نشان‌دهنده چگونگی بسط و گسترش زنجیره پلی‌پپتیدی است که از برقراری پیوند هیدروژنی بین اسیدهای‌آمینه‌ای که از یکدیگر زیاد دور نیستند، نتیجه می‌شود. ساختار سوم ناشی از برهمکنش‌های بین گروه‌های مختلفی است که در فاصله‌ای دور از یکدیگر بر روی زنجیره پپتید قرار دارند. تاخوردگی و ایجادخمیدگی در اثر این برهمکنش‌ها تعیین کننده ساختار سوم

می‌باشد. پروتئین‌هایی با بیش از یک زنجیره پلی‌پپتیدی ساختار چهارم دارند.

شکل شماره ۳ مشخصات این پروتئین را نشان می‌دهد. پروتئین RecA در *دینوکوکوس گوبینسیس* سویه I-O، دارای ۳۵۶ اسید آمینه و وزن مولکولی ۳۷۷۴۱ دالتون می‌باشد و محل قرارگرفتن آن در سیتوپلاسم سلول است. این پروتئین باعث هیدرولیز ATP در حضور DNA می‌شود. جذب DNA تک رشته‌ای وابسته به ATP توسط DNA دو رشته‌ای و هیبریداسیون وابسته به ATP در DNAهای تک رشته‌ای همولوگ از دیگر وظایف آن است. با LexA واکنش می‌دهد و باعث فعال شدن و شکست اتوکاتالیتیک می‌گردد (شکل ۳). دومین‌های پروتئین RecA با استفاده از سایت PFAM در شکل ۴ نمایه شده است.

.



Names and origin

Protein names	*Recommended name:* **Protein RecA** [RuleBase RU000526] [HAMAP-Rule MF_00268] *Alternative name(s):* Recombinase A [HAMAP-Rule MF_00268]
Gene names	Name: **recA** [HAMAP-Rule MF_00268] [EMBL AFD26760.1] Ordered Locus Names:DGo_CA2833 [EMBL AFD26760.1]
Organism	**Deinococcus gobiensis (strain DSM 21396 / JCM 16679 / CGMCC 1.7299 / I-0)** [Complete proteome] [HAMAP] [EMBL AFD26760.1]
Taxonomic identifier	745776 [NCBI]
Taxonomic lineage	Bacteria › Deinococcus-Thermus › Deinococci › Deinococcales › Deinococcaceae › Deinococcus ›

Protein attributes

Sequence length	356 AA.
Sequence status	Complete.
Protein existence	Inferred from homology

General annotation (Comments)

Function	Can catalyze the hydrolysis of ATP in the presence of single-stranded DNA, the ATP-dependent uptake of single-stranded DNA by duplex DNA, and the ATP-dependent hybridization of homologous single-stranded DNAs. It interacts with LexA causing its activation and leading to its autocatalytic cleavage [By similarity] [RuleBase RU000526] [HAMAP-Rule MF_00268] [SAAS SAAS013765]
Subcellular location	Cytoplasm [By similarity] [HAMAP-Rule MF_00268] [SAAS SAAS013765]
Sequence similarities	Belongs to the RecA family. [RuleBase RU004527] [HAMAP-Rule MF_00268]

Ontologies

Keywords

Biological process	DNA damage DNA recombination [RuleBase RU004527] [HAMAP-Rule MF_00268] [SAAS SAAS013765] DNA repair SOS response [RuleBase RU000526] [HAMAP-Rule MF_00268] [SAAS SAAS013765]
Cellular component	Cytoplasm [HAMAP-Rule MF_00268] [SAAS SAAS013765]
Ligand	ATP-binding [RuleBase RU004527] [HAMAP-Rule MF_00268] [SAAS SAAS013765] DNA-binding [RuleBase RU004527] [HAMAP-Rule MF_00268] [SAAS SAAS013765] Nucleotide-binding
Technical term	Complete proteome

Gene Ontology (GO)

Biological_process	DNA recombination Inferred from electronic annotation. Source: HAMAP DNA repair Inferred from electronic annotation. Source: HAMAP SOS response Inferred from electronic annotation. Source: HAMAP
Cellular_component	cytoplasm Inferred from electronic annotation. Source: UniProtKB-SubCell
Molecular_function	ATP binding Inferred from electronic annotation. Source: HAMAP DNA-dependent ATPase activity Inferred from electronic annotation. Source: HAMAP damaged DNA binding Inferred from electronic annotation. Source: HAMAP single-stranded DNA binding Inferred from electronic annotation. Source: HAMAP

Cross-references

Sequence databases	
EMBL GenBank DDBJ	CP002191 Genomic DNA. Translation: AFD26760.1.
RefSeq	YP_006262218.1. NC_017790.1.
3D structure databases	
ModBase	Search...
Protocols and materials databases	
StructuralBiologyKnowledgebase	Search...
Genome annotation databases	
EnsemblBacteria	AFD26760; AFD26760; DGo_CA2833.
GeneID	12817375.
KEGG	dgo:DGo_CA2833.

شکل ۳. مشخصات پروتئین RecA.

Figure 3. RecA protein profile.

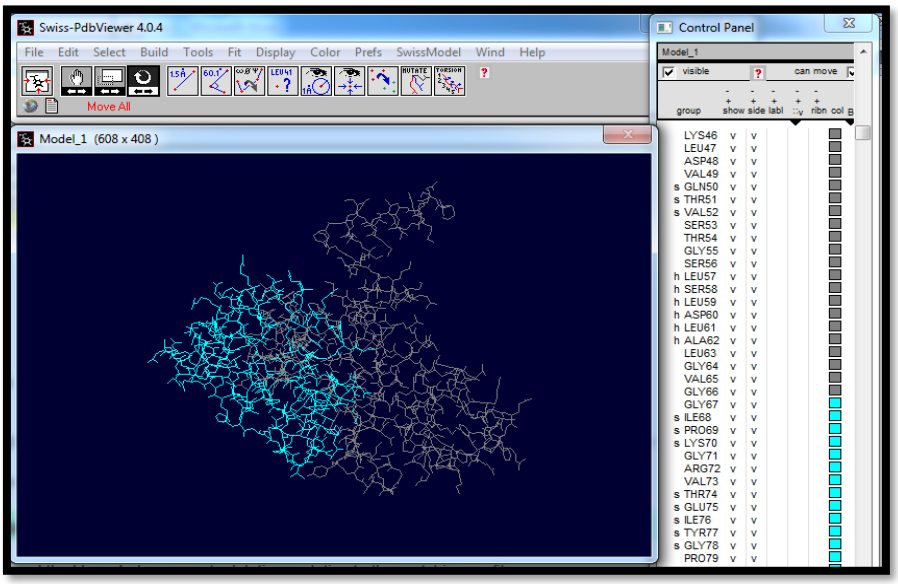
RecA

Source	Domain	Start	End
disorder	n/a	1	17
Pfam A	RecA	20	342
disorder	n/a	20	21
disorder	n/a	74	76
low_complexity	n/a	151	160
low_complexity	n/a	250	266
disorder	n/a	351	353

شکل ۴. نمایش شماتیک پروتئین RecA در سایت PFAM.

Figure 4. Schematic representation of the RecA protein at the PFAM site,

برای یافتن بخش‌های مهم در ساختار پروتئین مورد نظر از سایت Prosite استفاده شد. با استفاده از این سایت دومین حفاظتی پروتئین RecA شناسایی شد و با برنامه Swiss PDB Viewer اسیدهای‌آمینه مهم در پروتئین مورد بررسی قرارگرفت. نواحی آبی رنگ در شکل ۵ نواحی مهم و عملکردی پروتئین را نشان می‌دهد، این نواحی شامل گلایسین ۶۷، لیزین ۷۰، گلایسین ۷۱، آرژنین ۷۲، تیروزین ۷۷، گلوتامات ۷۵ و پروتئین ۷۹ می‌باشد. چنانچه موتاسیونی در این بخش رخ دهد ممکن است تأثیر نامطلوبی بر پروتئین بگذارد.



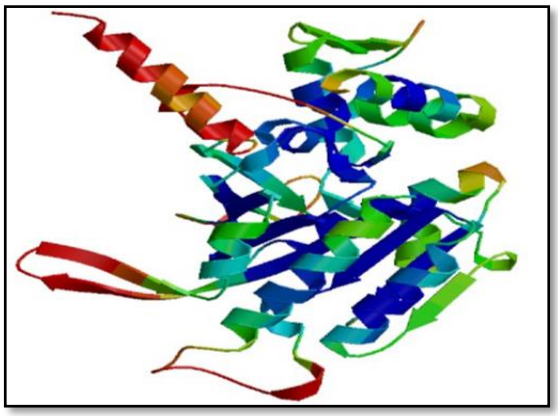
شکل ۵. دومین حفاظت شده پروتئین.

Figure 5. Conserved protein domain.

به منظور یافتن پروتئین‌های مشابه از نظر ساختاری، از سایت hssp Database استفاده شد. با توجه به اینکه این پایگاه داده نشان دهنده شباهت ساختارهایی است که تعیین ساختار شده‌اند و دارای کد PDB می‌باشند، اما پروتئین هدف، RecA در *دینوکوکوس گوبینسیس* سویه I-O، مدل‌سازی نشده است، بنابراین به منظور تعیین تشابه ساختاری این پروتئین با پروتئین RecA در *دینوکوکوس رادیودورانس*، که دارای تشابه توالی با پروتئین هدف است استفاده می‌گردد.

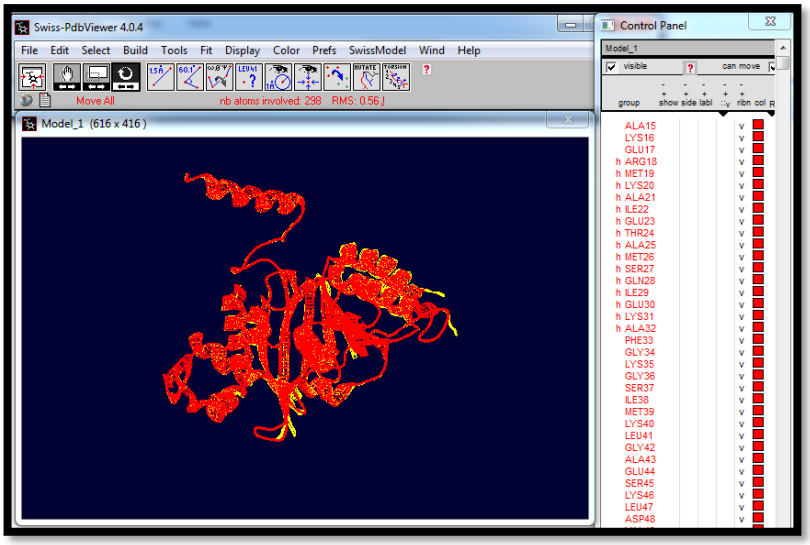
به منظور مدل‌سازی ساختمان سه بعدی پروتئین مورد مطالعه، ابتدا پروتئین دیگری که ساختار سه بعدی آن به روش تجربی تعیین نشده است به عنوان پروتئین الگو انتخاب می‌شود. بر اساس نتایج حاصل از همترازی دوتایی BLASTp در بانک اطلاعاتی Uniprot استفاده شد. براساس نتایج BLASTp پروتئین RecA

باکتری *دینوکوکوس گوبینسیس* سویه I-O دارای ۹۳درصد شباهت ساختاری به RecA باکتری *دینوکوکوس رادیودورانس* سویه ATCC 13939 را دارد و به عنوان الگو برای تعیین ساختار سه بعدی پروتئین انتخاب شد. این پروتئین با روش کریستالوگرافی اشعه X تعیین ساختار شده است و در سایت PDB با کد 1xp8 A شناخته می‌شود. از سایت Swiss model برنامه alignment mode به منظور طراحی مدل پروتئین هدف یعنی RecA باکتری *دینوکوکوس گوبینسیس* سویه I-O استفاده شد (شکل ۶). جهت بررسی کیفیت مدل‌سازی با استفاده از نرم افزار SPDBV_4.04_PC، روی هم‌افتادگی پروتئین مدل‌سازی شده و پروتئین الگو (Magic fit) مورد بررسی قرارگرفت که در شکل ۷ نشان داده شده است. سپس میزان میانگین مربع (RMS)[1] محاسبه شده ۰/۵۶ آنگستروم برآورد شد که این مقدار کمتر از یک (≤۱) نشان دهنده مناسب بودن مدل طراحی شده می‌باشد. یکی از ویژگی‌های پروتئین الگو، داشتن فعالیت ترانسفرازی است. طبق اطلاعات بدست آمده از سایت Uniprot (PDBe View)، نشان داده شده است که زنجیره‌های پروتئین مورد نظر دارای ترکیبات سیتوپلاسمیک می‌باشد که طی پروسه‌ی کاتابولیکی بیگانه زیست‌ها شرکت دارند.



شکل ۶. ساختار سه بعدی پروتئین RecA گرفته شده از سایت PFAM.

Figure 6. Three-dimensional structure of the RecA protein obtained from the PFAM database.



شکل ۷. مقایسه ساختار سه‌بعدی پروتئین‌های RecA در *دینوکوکوس رادیودورانس* به عنوان الگو (رنگ زرد) و *دینوکوکوس گوبینسیس* (رنگ قرمز).

Figure 7. Comparison of the three-dimensional structures of RecA proteins from *Deinococcus radiodurans* (used as the reference; shown in yellow) and *D. gobiensis* (shown in red).

[1] Root-Mean-Square

بحث

با توجه به عملکرد و شناسایی نواحی مهم پروتئین، هرگونه جهشی که موجب تغییر در ناحیه ساختاری پروتئین و نوع اسیدآمینه بر ساختار مارپیچ آلفا و یا صفحات پروتئینی تأثیر گذارد، نقش منفی در عملکرد پروتئین باکتری‌ها به جا خواهد گذاشت که منجر به از دست رفتن زیست‌پذیری سلول می‌شود (۹). یکی از این پروتئین‌ها RecA، از اعضا خانواده Recombinase A می‌باشد، بنابراین عملکردی که برای این پروتئین پیش‌بینی می‌شود این است که در ترمیم و نوترکیبی DNA نقش مهمی ایفا می‌کند و به‌دلیل مقاومت بالایی که باکتری *دینوکوکوس گوبینسیس* سویه I-O در برابر تشعشعات یونیزه‌کننده فرابنفش نشان می‌دهد، به نظر می‌رسد این پروتئین در ترمیم شکست‌های موجود در دو رشته DNA نقش مؤثرتری دارد. RecA از جمله پروتئینی است که برای عملکرد خود به اسید آمینه متیونین نیاز دارد، اگر موتاسیونی در این اسید آمینه ایجاد شود، موجب اختلال در عملکرد پروتئین می‌گردد. اسید آمینه‌هایی که در ساختار صفحات بتا قرار دارند، والین، آسپارتات، تیروزین هستند که اگر هر یک از این اسید آمینه‌ها حذف گردند و یا تغییری داشته باشند، ساختار بتا نیز تغییر می‌کند. در ساختار انتهای C-ت و انتهای N- چندین مارپیچ آبگریز وجود دارد که دارای اسیدآمینه‌های آلانین، سرین، هیستیدین، گلوتامین و آرژنین هستند که جزء اسیدآمینه‌های باردار می‌باشد. اگر چنین اسیدآمینه‌هایی توسط اسیدآمینه‌ای بدون بار مثل گلایسین جایگزین گردد، مارپیچ پروتئین دچار به هم‌خوردگی شده و موجب تغییر آرایش می‌شود و اتصال آن به سوبسترایش کاهش می‌یابد. پروتئین RecA توانایی اتصال به نوکلئوتید و ATP دارد و فعالیت آن وابسته به خاصیت ATPase می‌باشد. علاوه بر نقش‌های ذکر شده برای عملکرد آن، این پروتئین در ایجاد پاسخ‌های SOS ناشی از آسیب‌های DNA نیز نقش مهمی برعهده دارد (۲۰). ضایعات DNA ناشی از گونه‌های فعال اکسیژن (ROS)[1] برای دهه‌های متمادی، به ویژه در رابطه با تاثیر آن‌ها بر جهش‌زایی و سرطان، مورد مطالعه قرار گرفته‌اند. کار حاضر با نشان دادن اینکه *RecA*، عنصر کلیدی در ترمیم نوترکیبی و القای SOS، خود تحت تهدید ROS است، بینش جدیدی در مورد چالش ناشی از ROS برای یکپارچگی DNA ارائه می‌دهد و لایه جدیدی را در رابطه بین استرس اکسیداتیو و ترمیم/نوترکیبی DNA آشکار می‌کند، زیرا اختلال در فعالیت RecA توسط اکسیداسیون، عواقب گسترده‌ای را در بسیاری از تراکنش‌های مرتبط با DNA به همراه خواهد داشت. همین امر به احتمال زیاد در موجودات پیچیده‌تری مانند انسان نیز صادق است زیرا *RecA* بسیار حفاظت شده است و عواقب اکسیداسیون *RecA* انسانی در آسیب‌شناسی‌های مرتبط با آسیب DNA نیز قابل انتظار است (۲۱).

نتیجه‌گیری

با توجه به تفاوت زیاد در مقاومت باکتری‌ها نسبت به تشعشعات یونیزه‌کننده در مقایسه با اعضاء جنس *دینوکوکوس* و توالی‌های *RecA* باکتریایی، احتمالا مهندسی پروتئین در آینده علت تفاوت‌ها و عملکرد پروتئین‌های RecA باکتریایی را بررسی خواهد نمود. بنابراین با پیش‌بینی ساختارهای سه‌بعدی و به دنبال آن عملکرد پروتئین‌ها و مدل‌سازی آن‌ها می‌توان با کمک علم بیوانفورماتیک و با طراحی پروتئین‌هایی با ویژگی‌های مشابه و منحصر به فرد تعیین ساختار شده در دیگر گونه‌ها، از جمله مقاومت به شرایط سخت به موفقیت‌های بزرگی دست یافت.

تقدیر و تشکر

در این مطالعه لازم می‌باشد، از زحمات خانم دکتر محبوبه ضرابی، دانشیار گروه بیوتکنولوژی دانشگاه الزهرا (س) تشکر و قدردانی شود.

Refrences

1. Khan A, Liu G, Zhang G, Li X. Radiation-resistant bacteria in desiccated soil and their potentiality in applied sciences. 2024;(June). doi: 10.3389/fmicb.2024.1348758
2. Devi R, Kaur T, Negi R, Sharma B, Chowdhury S, Kapoor M, et al. Biodiversity , mechanisms , and potential biotechnological applications of minerals solubilizing extremophilic microbes : A review. 2024;12(5):23–40. doi: 10.7324/JABB.2024.159821
3. Yuan M, Chen M, Zhang W, Lu W, Wang J, Yang M, et al. Genome Sequence and Transcriptome Analysis of the Radioresistant Bacterium *Deinococcus gobiensis* : Insights into the Extreme Environmental Adaptations. 2012;7(3):1–11. doi:10.1371/journal.pone.0034458 Editor:
4. Hee J, Jong L, Jung H, Kyu M, Sangyong K. *Deinococcus taeanensis* sp . nov ., a Radiation - Resistant Bacterium Isolated from a Coastal Dune. Curr Microbiol [Internet]. 2022;79(11):1–8. Available from: doi.org/10.1007/s00284-022-03044-8
5. Groot A De, Blanchard L, Rouhier N, Rey P. Thiol

[1] Reactive oxygen species

Reductases in *Deinococcus Bacteria* and Roles in Stress Tolerance. 2022; doi.org/10.3390/ antiox11030561
6.Rollo F, Martins GD, Gouveia AG, Moe E. Insights into the role of three Endonuclease III enzymes for oxidative stress resistance in the extremely radiation resistant bacterium *Deinococcus radiodurans*. 2023;(September):1–11. doi: 10.3389/fmicb.2023.1266785
7. Abbaszadeh J. The Ecology and Evolutionary History of the *Deinococcaceae* Family. Res Commons. 2024;1994.
8. Groot A De. DNA repair and oxidative stress defense systems in radiation-resistant *Deinococcus murrayi*. 2023;431:416–31. doi.org/10.1139/cjm-2023-0074
9. Kumar J, Ghosh P, Kumar A. Ultraviolet-B Radiation Stress-Induced Toxicity and Alterations in Proteome of *Deinococcus radiodurans*. 2021;005:1–15. doi: 10.1159/000512018
10. http://www.uniprot.org/
11. http://www.ncbi.nlm.nih.gov/
12. http://pfam.sanger.ac.uk
13. http://www.ebi.ac.uk/interpro/
14. http://prosite.expasy.org/
15. *http://www. primer3.sourceforge.net*
16.http://www.rcsb.org/pdb/explore/explore.do?structureId=1xp8
17.http://srs.ebi.ac.uk/srsbin/cgi-bin/wgetz?-page+LibInfo+-lib+HSSP
18. http://swissmodel.expasy.org/
19. http://spdbv.vital-it.ch
20. Prostova M, Shilkin E, Kulikova AA, Makarova A, Ryazansky S, Kulbachinskiy A. Noncanonical prokaryotic X family DNA polymerases lack polymerase activity and act as exonucleases. 2022;50(11):38–40. doi.org/10.1093/nar/gkac461
21. Henry C, Loiseau L, Ezraty B, et al. Redox controls RecA protein activity via reversible oxdidation of its methionine residues. 2021; https://doi.org/10.7554/eLife.63747