**SAXS CURVES PREDICTION FOR HUMAN TRANSGLUTAMINASES**

A.V. Alexandrova1, S.D. Ivashchenko1,2, A.V. Vlasov\*1,2,3

1Research Center for Molecular Mechanisms of Aging and Age-Related Diseases, Moscow Institute of Physics and Technology, 141701 Dolgoprudny, Russia

2Laboratory of Microbiology, BIOTECH University, 125080 Moscow, Russia

3Joint institute for nuclear research, 141980 Dubna, Russia

e-mail: vavplanet@mail.ru

**Abstract** - Transglutaminases (TGs) are a unique group of enzymes that facilitate the post-translational modification of proteins by forming isopeptide bonds. Understanding that diverse processes such as normal and cancerous cell growth, reproduction, and cell death rely on sufficient levels of transglutaminases and that these enzymes can influence the differentiation and proliferation of various cell types has led many researchers to explore these intriguing molecules. Additionally, transglutaminases play a role in several diseases, including celiac disease and neurological disorders. In mammals, nine distinct isoenzymes of TGs have been identified at the genomic level. However, only a limited number of proteins possess reliable structures for future studies, while most have only partial structures.

We have predicted open and closed conformations of TG1, TG3, TG4, TG5, TG6, TG7 using AlphaFold and have calculated theoretical SAXS curves for each model using CRYSOL software. Moreover, we demonstrated the ability to distinguish open and closed conformation of TG1 using SAXS.

**ПРЕДСКАЗАНИЕ КРИВЫХ МАЛОУГЛОВОГО РЕНТГЕНОВСКОГО РАССЕЯНИЯ ДЛЯ ЧЕЛОВЕЧЕСКИХ ТРАНСГЛУТАМИНАЗ**

А.В. Александрова1, С.Д. Иващенко1,2, А.В. Власов\*1,2,3

1Центр исследований молекулярных механизмов старения и возрастных заболеваний, Московский физико-технический институт, 141701 Долгопрудный, Россия

2Лаборатория микробиологии, РОСБИОТЕХ, 125080 Москва, Россия

3Объединенный институт ядерных исследований, 141980 Дубна, Россия

электронная почта: vavplanet@mail.ru

**Аннотация -** Трансглутаминазы (ТГазы) являются уникальной группой ферментов, которые способствуют посттрансляционной модификации белков, образуя изопептидные связи. Понимание того, что разнообразные процессы, такие как нормальный и опухолевый рост клеток, репродукция и смерть клеток зависят от достаточного уровня трансглутаминаз и что эти ферменты могут влиять на дифференцировку и пролиферацию различных типов клеток, побудило многих исследователей изучать эти увлекательные молекулы. Кроме того, трансглутаминазы играют роль в многих заболеваниях, включая целиакию и неврологические расстройства. У млекопитающих на геномном уровне были идентифицированы девять различных изоферментов ТГаз. Однако только малое количество этих белков обладает надежными структурами для будущих исследований, в то время как большинство имеет только частично разрешенные структуры. Мы предсказали открытые и закрытые конформации TГ1, TГ3, TГ4, TГ5, TГ6, TГ7 с использованием AlphaFold и рассчитали теоретические кривые МУРР для каждой модели с помощью программного обеспечения CRYSOL. Более того, мы продемонстрировали возможность различать открытые и закрытые конформации TГ1 с использованием МУРР.