

# Альтернативные положения, В-фактор, кристалл

## Задание 1

Необходимо было показать альтернативные положения остатка глутаминовой кислоты в цепи В белка с PDB ID **3Q3Y**. Пурпурным показана конформация «А», жёлтым – «В». Из рисунка видно, что положение В стабилизировано лишь одной водородной связью (показаны желтым пунктиром) с глицином, а положение А, в свою очередь, стабилизировано не только аналогичной водородной связью, но и солевым мостиком (голубой пунктир). Но конформация В дополнительно стабилизирована остовом пролина, с которым глутамат связан через водный мостик.

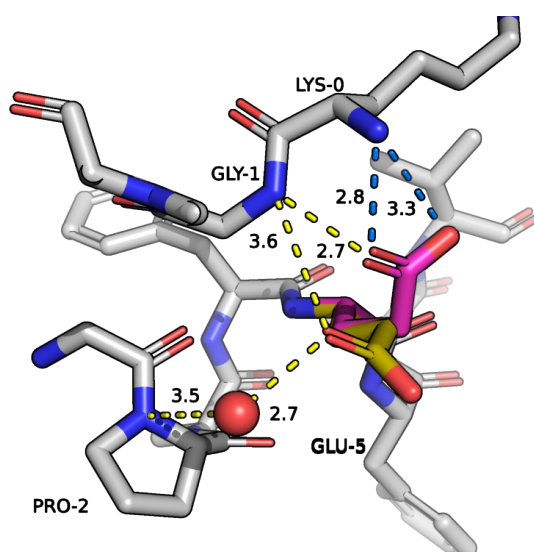


Рисунок 1: Два альтернативных положения Glu5 в цепи В протеазы 3Q3Y.

Таким образом, можно предположить, что, так как конформация А обладает бóльшим числом стабилизирующих связей, то и она является преобладающей, но не очень сильно.

Действительно, если открыть исходный *.cif* файл, то можно заметить, что осцилляции относятся как 2:1 соответственно. Это можно интерпретировать как долю ячеек с соответствующим положением аминокислотного остатка.

Так, предположение, полученное на основе числа стабилизирующих связей, было подтверждено.

1209	АТОМ	37	N N	.	GLU A 1 7	?	-9.158	1.870	-20.407	1.00	18.82	? 5	GLU A N	1
1210	АТОМ	38	C CA	A	GLU A 1 7	?	-8.057	1.267	-21.157	0.67	15.99	? 5	GLU A CA	1
1211	АТОМ	39	C CA	B	GLU A 1 7	?	-8.082	1.261	-21.156	0.33	18.47	? 5	GLU A CA	1
1212	АТОМ	40	C C	.	GLU A 1 7	?	-8.308	1.431	-22.657	1.00	13.59	? 5	GLU A C	1
1213	АТОМ	41	O O	.	GLU A 1 7	?	-7.421	1.843	-23.396	1.00	12.49	? 5	GLU A O	1
1214	АТОМ	42	C CB	A	GLU A 1 7	?	-7.904	-0.235	-20.814	0.67	21.24	? 5	GLU A CB	1
1215	АТОМ	43	C CB	B	GLU A 1 7	?	-8.050	-0.213	-20.800	0.33	23.00	? 5	GLU A CB	1
1216	АТОМ	44	C CG	A	GLU A 1 7	?	-6.708	-0.918	-21.494	0.67	23.16	? 5	GLU A CG	1
1217	АТОМ	45	C CG	B	GLU A 1 7	?	-6.891	-0.956	-21.334	0.33	22.27	? 5	GLU A CG	1
1218	АТОМ	46	C CD	A	GLU A 1 7	?	-5.405	-0.799	-20.702	0.67	22.17	? 5	GLU A CD	1
1219	АТОМ	47	C CD	B	GLU A 1 7	?	-6.904	-2.359	-20.824	0.33	17.47	? 5	GLU A CD	1
1220	АТОМ	48	O OE1	A	GLU A 1 7	?	-5.352	-1.304	-19.561	0.67	22.22	? 5	GLU A OE1	1
1221	АТОМ	49	O OE1	B	GLU A 1 7	?	-7.080	-2.542	-19.596	0.33	16.69	? 5	GLU A OE1	1
1222	АТОМ	50	O OE2	A	GLU A 1 7	?	-4.429	-0.223	-21.226	0.67	22.65	? 5	GLU A OE2	1
1223	АТОМ	51	O OE2	B	GLU A 1 7	?	-6.777	-3.271	-21.655	0.33	18.09	? 5	GLU A OE2	1

Рисунок 2: Информация о структуре 3Q3Y.

## Задание 2

Необходимо было посмотреть отличия В-фактора в различных частях молекулы, в остове и в аминокислотных остатках.

Как видно из рисунка 3, большее значение фактора мы наблюдаем у частей остова, ближе расположенных к «поверхности» белка. Это обусловлено большей стабилизацией внутренних участков остова контактами друг с другом. На периферии возможно больше движения, а это и есть то, что отражает В-фактор, – смещение атомов от их среднего положения в кристалле, которое обусловлено подвижностью.

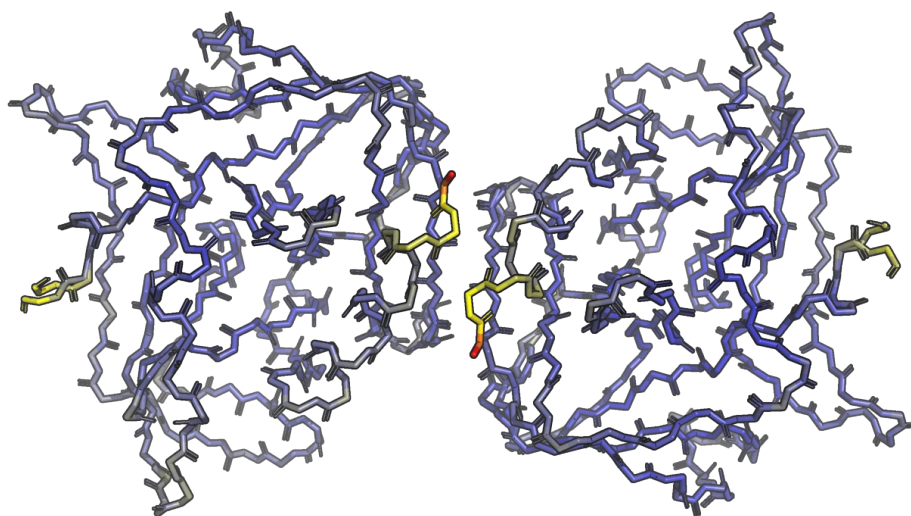


Рисунок 3: Остов молекулы, окрашенный в соответствии со значением В-фактора. Синий цвет соответствует малым значениям, желтый -- средним, красный -- высоким. Окраска относительна.

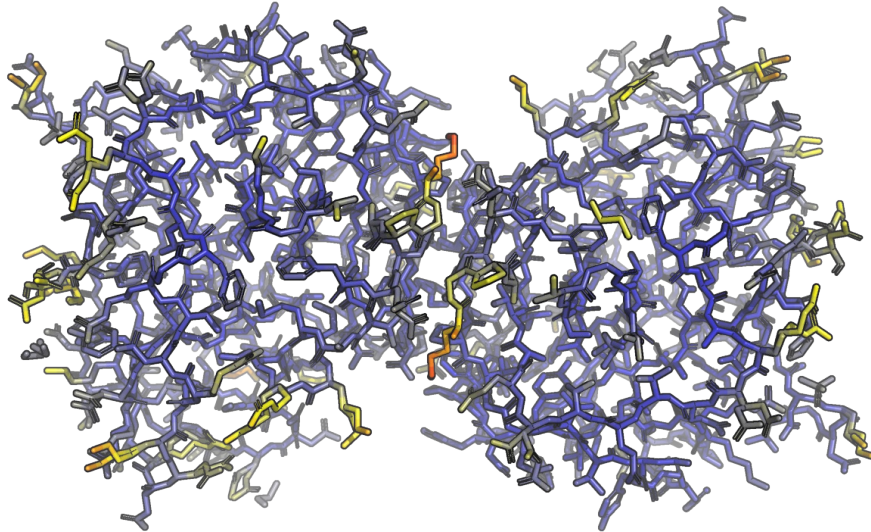


Рисунок 4: Белок, окрашенный в соответствии со значением В-фактора. Синий цвет соответствует малым значениям, желтый -- средним, красный -- высоким. Окраска относительна.

Как видно из четвертого рисунка, боковые радикалы более подвижны, чем остов, что логично.

Для просмотра зависимости покрытия атомов электронной плотностью и значением В-фактора я выбрал Lys-0, с которым мы уже встречались в начале практикума.

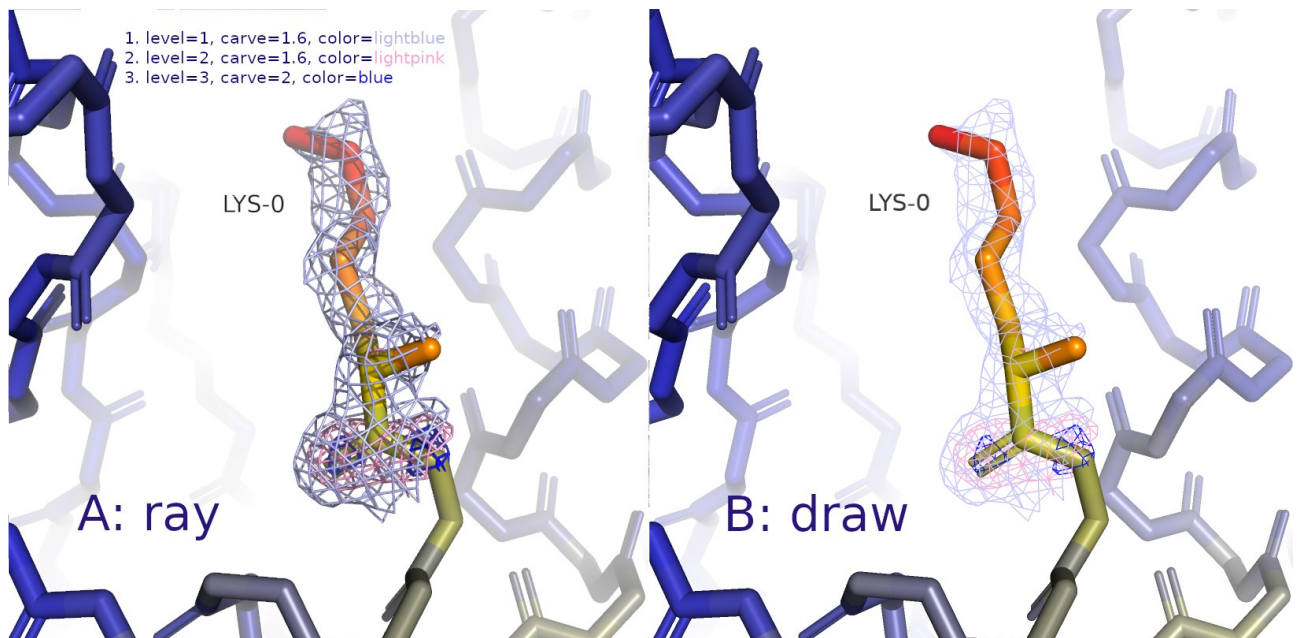


Рисунок 5: Электронная плотность LYS-0 на 1 (серый), 2 (розовый), 3 (синий) уровнях подрезки. Значения carve 1.6, 1.6 и 2 соответственно. А: отрисовка с помощью ray tracing, В: просто draw.

Из рисунка 5 видно, что более подвижные части, то есть части с высоким B-фактором, хуже покрыты электронной плотностью. Особенно это заметно на высоком уровне подрезки.

Это то, что мы и должны были ожидать, видя значения B-фактора, так как ЭП должна быть более размазана по пространству, а значит нам нужно ставить меньший уровень подрезки, чтобы её увидеть.

### Задание 3

Соседями назовём белки из двух цепей, имеющие непосредственный визуальный контакт с нашим белком при визуализации в виде surface. Изначально было сгенерировано 14 соседних структур, но лишь 8 из них имеют непосредственный контакт. Часть белков связаны лишь одной парой цепей, а часть контактирует сразу обеими цепями.

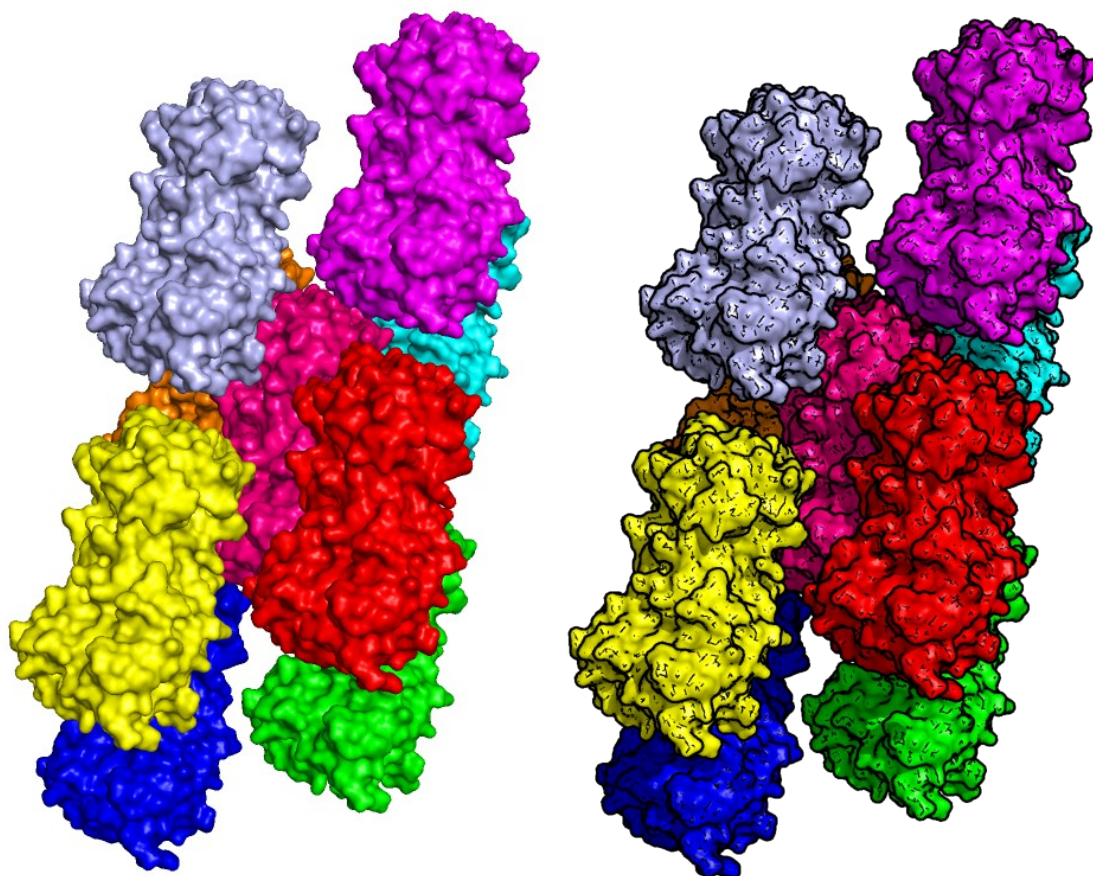


Рисунок 6: Часть регулярной структуры кристалла: соседи белка 3Q3Y. Draw и ray соответственно. Исходная структура окрашена в розовый, локализована в центре.