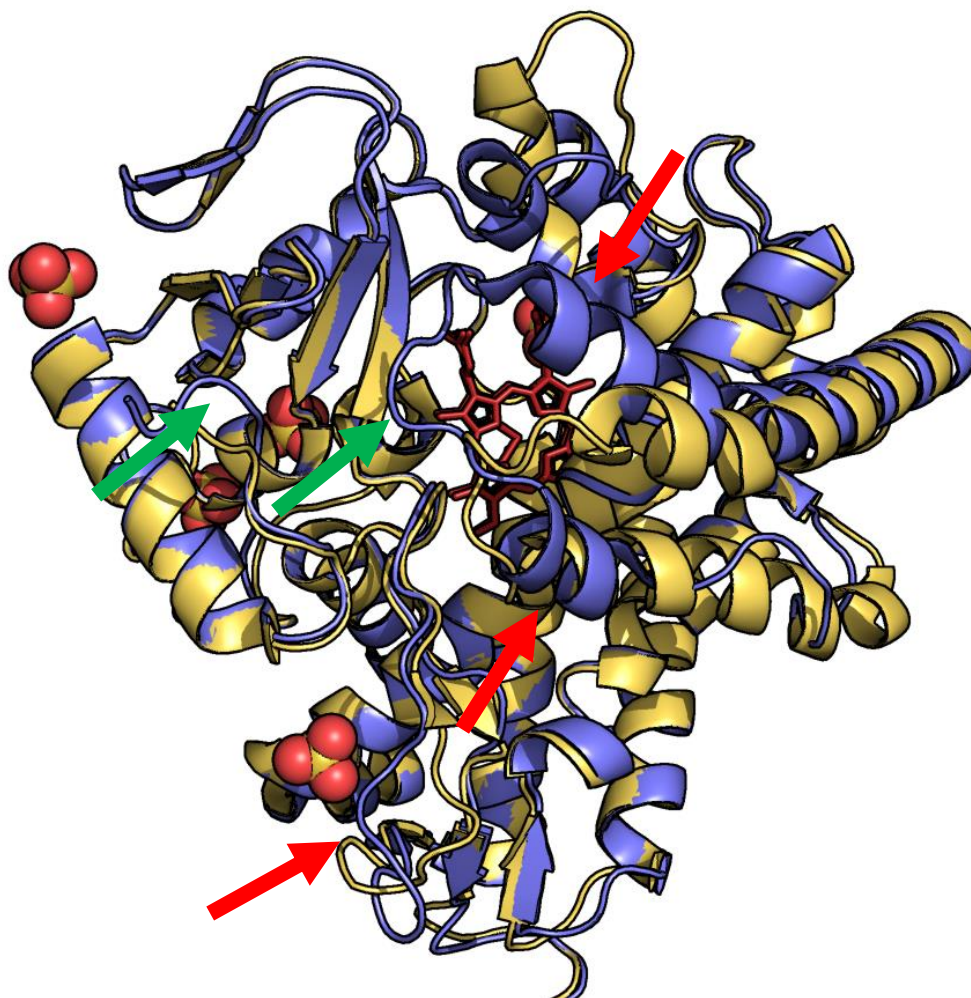


## Поверхности, карманы, рКа

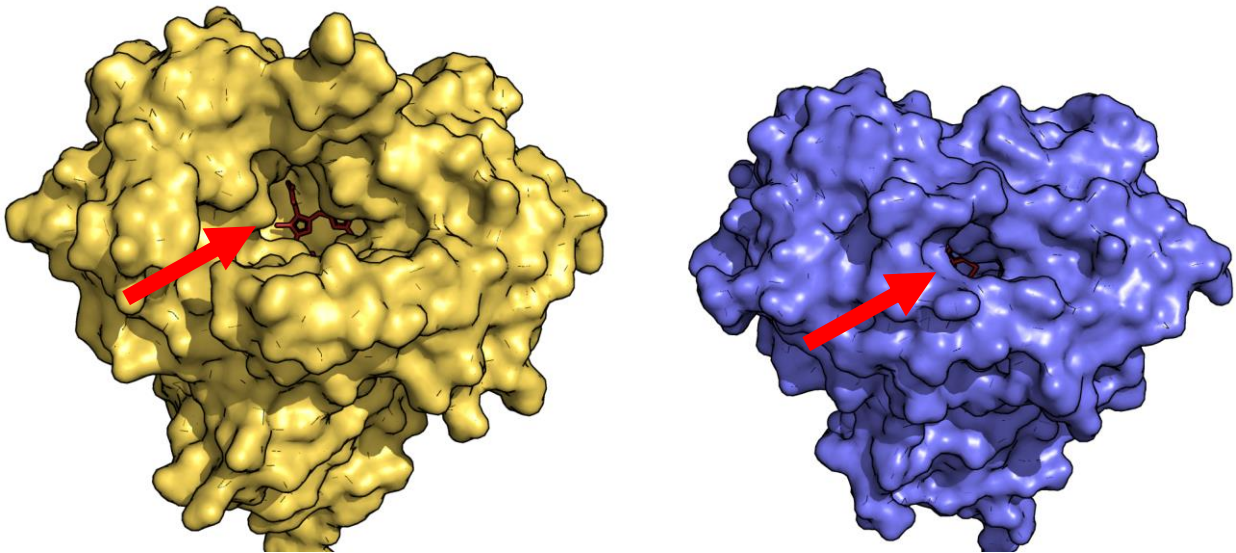
### SASA, MSA

Для данного задания были даны структуры 2W1O (открытая форма) и 2JJN (закрытая форма) цитохрома P450. Эти структуры очень похожи, есть различия в положении некоторых петель и альфа-спиралей в активном центре (Рис. 1)



**Рисунок 1.** Структуры 2W1O (открытая форма - желтая) и 2JJN (закрытая форма - синяя) цитохрома P450. Стрелками помечены основные различия в положении петель и альфа-спиралей. Зелеными стрелками помечены участки, обсуждаемые в задании 3.

Если включить отображение поверхности, можно четко увидеть образующийся карман (Рис. 2).



**Рисунок 2.** Структуры 2WIO (открытая форма - желтая) и 2JJN (закрытая форма - синяя) цитохрома P450. Стрелками помечен карман связывания.

Если посмотреть зависимость величины площади от способа измерения (Таблица 1), то можно заметить, что молекулярная площадь поверхности больше, чем площадь доступная растворителю. Это может быть связано с тем, что при вычислении MS не происходит перекрывания радиусов как в SAS, а значит поверхность впадин тоже попадает в вычисление.

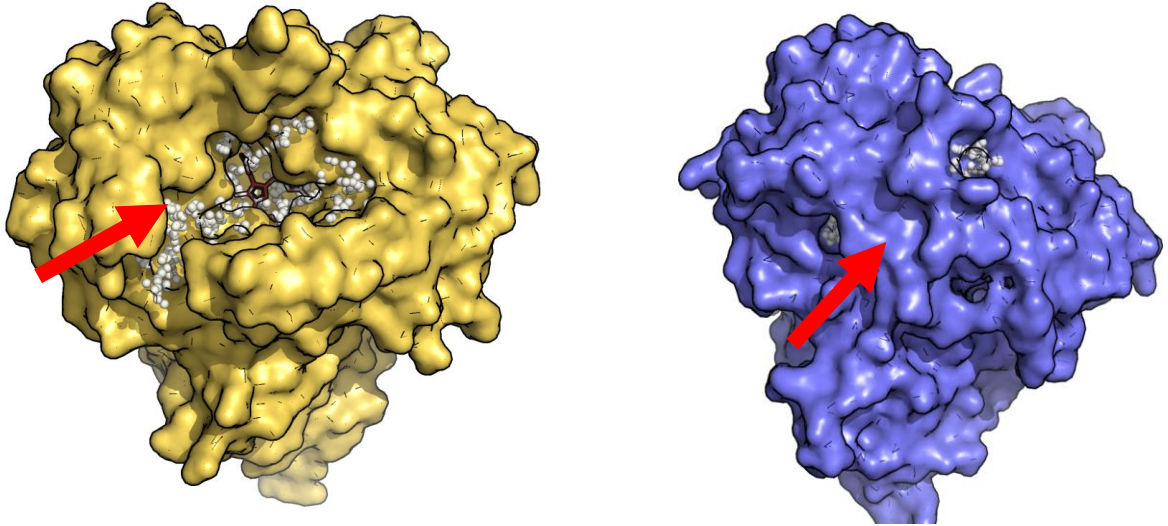
Кроме того, у закрытой формы площадь больше. Это может быть связано с тем, что при закрытии экспонируются некоторые остатки, погруженные в белок в открытой конформации.

**Таблица 1.** Значение площади.

	2WIO	2JJN
MS, Angstroms <sup>2</sup>	49208.242	57535.012
SAS, Angstroms <sup>2</sup>	30682.855	42761.406

### Карманы, объем

Программа frocket определила 27 возможных карманов связывания в открытой структуре и 31 в закрытой. Большинство из них не выглядят правдоподобно, однако карман активного центра определен в обеих структурах (Рис. 3).



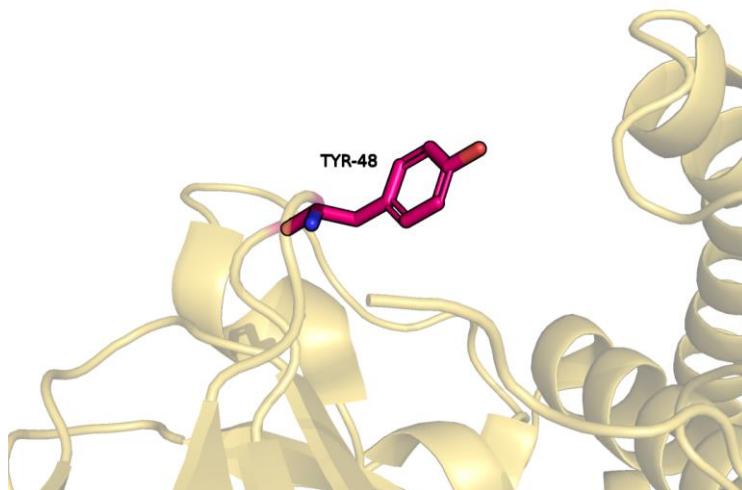
**Рисунок 3.** Структуры 2WIO (открытая форма - желтая) и 2JJN (закрытая форма - синяя) цитохрома P450. Карман связывания помечен белым и отмечен стрелкой.

В открытой структуре его площадь составляет  $9219.5 \text{ Angstroms}^3$ , а в закрытой  $5744.66 \text{ Angstroms}^3$ .

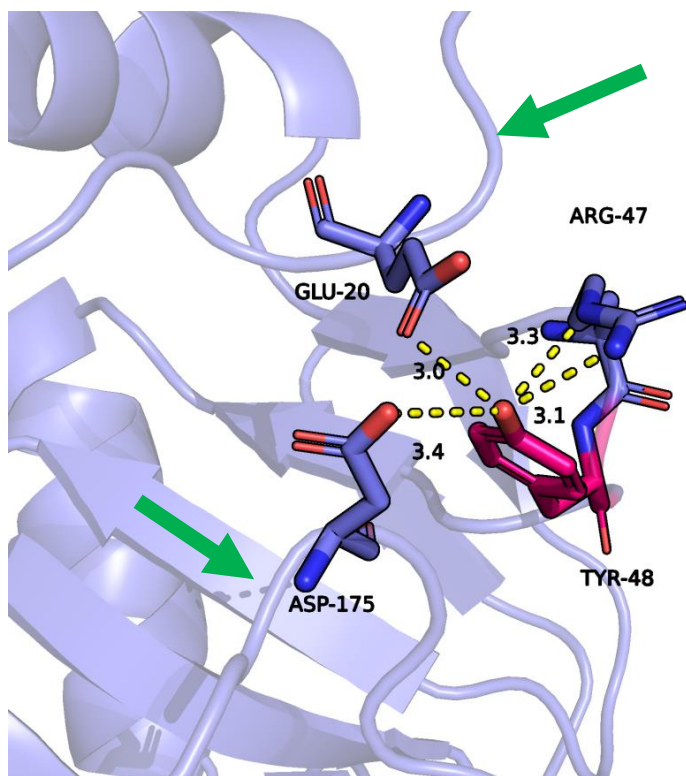
Из литературы известно, что закрытие сайта происходит после связывания субстрата (фермент, судя по исследованиям, функционирует в закрытой форме).

### Экспонированность

Больше всего свою экспонированность по модулю изменил остаток TYR48 (разница составляет 120). Он находится рядом с петлями, помеченными зеленой стрелкой в первом задании (Рис. 1). В открытой конформации (Рис. 4) ему ничего не мешает взаимодействовать с растворителем. В закрытой конформации (Рис. 5) он, судя по всему, участвует в непосредственном закрытии кармана и образует водородные связи с соседями для стабилизации отмеченных ранее петель, что мешает ему связываться с растворителем.



**Рисунок 4.** Структура 2WIO (открытая форма - желтая). Положение TYR48 (розовый).



**Рисунок 5.** Структура 2JJN (закрытая форма - синяя). Положение TYR48 (розовый). Образующиеся водородные связи обозначены желтым. Подвижные петли обозначены зелеными стрелками.