

# Разметка вторичной структуры

## Знакомство с укладками

Для данного задания были даны 10 структур, имеющих по последовательностям не более 40% попарного сходства. Было сделано выравнивание их всех по структуре(3hкxА00) (Рис. 1).

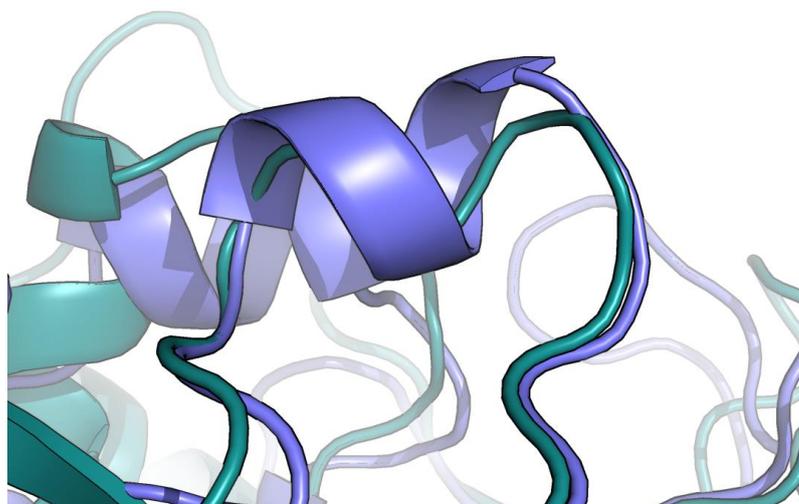


**Рисунок 1.** Выравнивание структур по 3hкxА00.

Можно заметить, что есть сходство, однако расположение петель и укладка альфа-спиралей довольно разные. Кроме того, структура 2vhhА00 (розовый) имеет дополнительную часть из 3 альфа спиралей (отмечена стрелкой), которой нет у других структур.

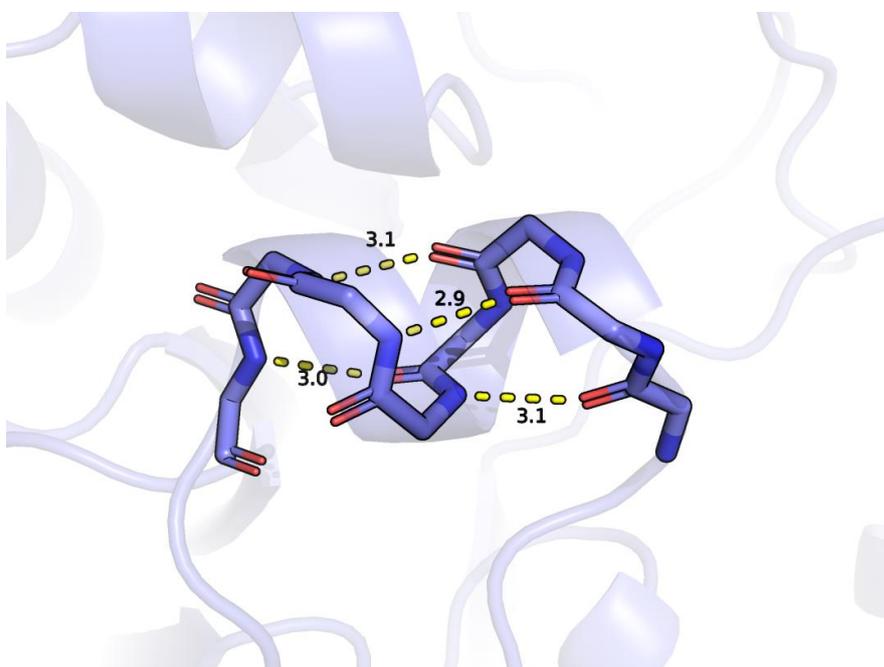
## Работа с разметкой вторичной структуры в ручном режиме

Для сравнения были выбраны структуры 3hкxА00 (синий) и 4суfА01 (зеленый), а именно участок, представленный альфа-спиралью у 3hкxА00 (116-123 ак) и просто петель у 4суfА01 (183-188 ак) (Рис. 2). Этот участок находится в одном месте в пространстве, но отличается по последовательности.

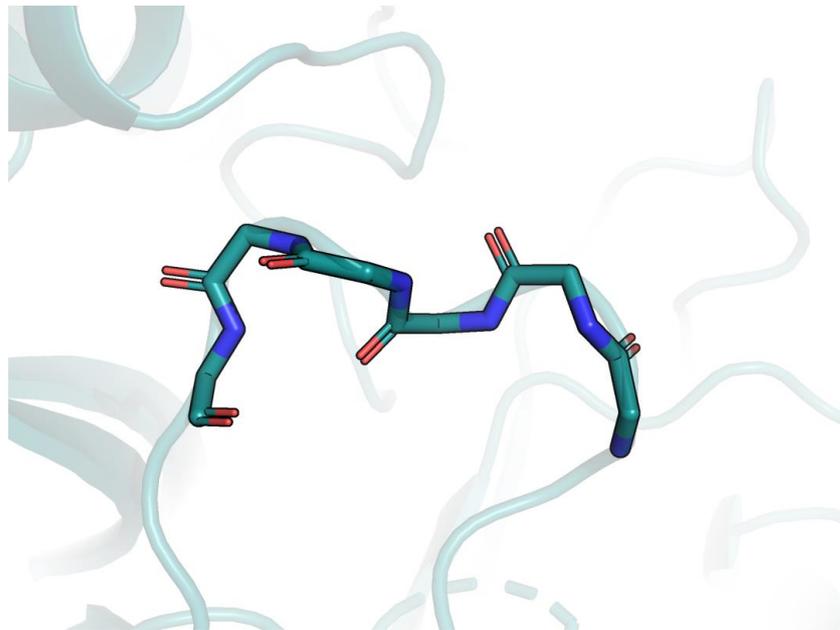


**Рисунок 2.** Сравнение участка 3hkxA00 (синий) и 4cufA01 (зеленый).

При рассмотрении водородных связей можно заметить, что в 3hkxA00 (Рис. 3) действительно возможно образование спирали, тогда как в 4cufA01 (Рис. 4) это невозможно из-за геометрии. Кроме того, аминокислотная последовательность этого участка разная, поэтому его расположение в пространстве не одинаково, что также препятствует образованию альфа-спирали. Таким образом, я бы сказал, что алгоритм Rmol сработал верно (эта спираль, что интересно, присутствует почти во всех структурах, хотя и с разным количеством витков).



**Рисунок 3.** Альфа-спираль участка 3hkxA00 (синий). Водородные связи показаны желтым.



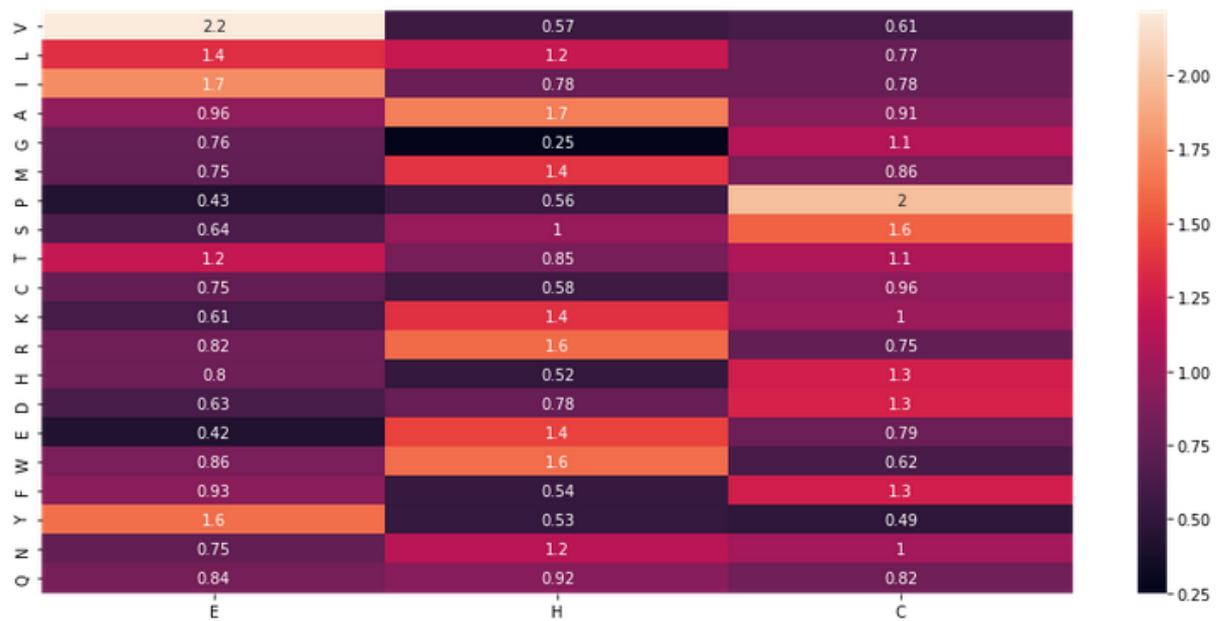
**Рисунок 4.** Петля участка 4cyfA01 (зеленый).

### **Работа с разметкой вторичной структуры в автоматическом режиме**

Для каждого из 10 pdb была сгенерирована разметка вторичной структуры с помощью dssp и рассчитаны склонности каждого типа аминокислоты образовывать тот или иной тип вторичной структуры (amino acid secondary structure propensity).

В результате (Рис. 5):

- Какой тип остатка заметно чаще образует альфа-спирали, чем бета-листы и петли?  
A, M, K, R, E, W
- Какой тип остатка заметно чаще образует бета-листы, чем альфа-спирали и петли?  
V, I, Y
- Какой тип остатка заметно чаще образует петли, чем альфа-спирали и бета-листы?  
G, P, S, H, D, F



**Рисунок 5.** Heatmap. Склонность образовывать типы вторичной структуры для различных аминокислот (E —лист, H —спираль, C —петли).