

Интерпретация ЯМР структуры

Для работы был выбран белок тирозиновая фосфатаза быка. Белок представляет собой мономер, длина белковой цепи которого составляет 157 аминокислотных остатков. Его структура получена методами РСА и ЯМР.

Параметры структуры РСА:

- Идентификатор PDB 1DG9
- Разрешение 1,9 Å

Параметры структуры ЯМР:

- Идентификатор PDB 1BVH
- 15 моделей

На рисунке 1 представлено совмещение структур РСА и ЯМР, построенное с помощью программы [LCore](#) со стандартными параметрами. Можно заметить, что вторичные структуры соотносятся весьма хорошо. Однако области, соответствующие петлям, заметно различаются.

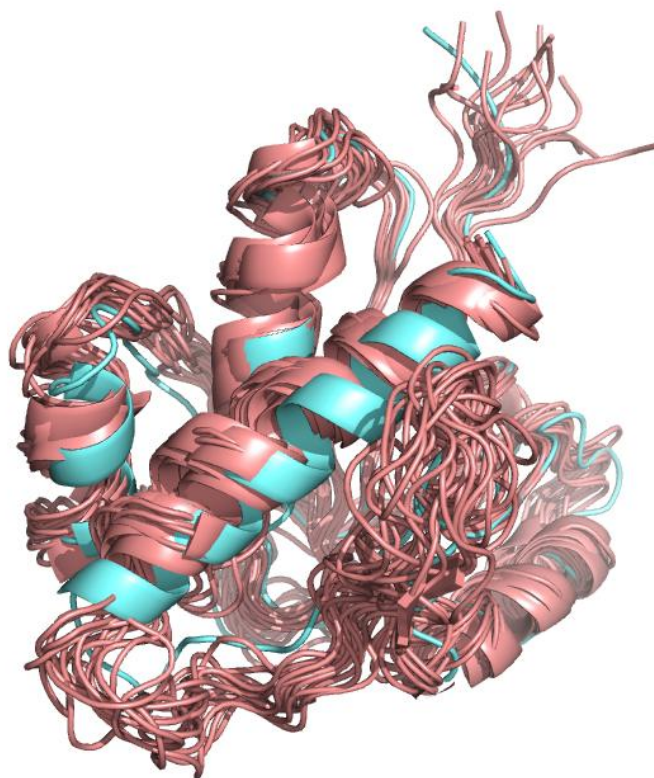


Рисунок 1. Совмещение структур 1DG9 и 1BVH.

Рассмотрим, сохраняются ли водородные связи в структурах, полученных двумя методами. Будем считать, что между донором протона и акцептором есть водородная связь, если расстояние между ними меньше 3,5 ангстрем. Атом водорода должен быть на линии донор-акцептор или отклоняться от этой линии не более чем на 70 градусов. Для анализа выберем три водородные связи в структуре РСА:

- остовную в альфа-спирали: O ALA 24 - N LYS 28 (рис. 2);
- водородную связь боковых цепей в ядре белка ND2 ASN15 - OG SER19 (рис. 3);
- водородную связь в петлях, выходящих на поверхность глобулы N GLN 122 - OD1 ASP 120 (рис. 4).

Результат сравнения наличия водородных связей и их длины представлен в таблице 1. Мы видим, что сохранение водородных связей зависит от их положения: остовная связь в ядре белка есть во всех структурах (ядро молекулы «жесткое»), а водородная связь на поверхности присутствует только в кристалле, но не в растворе, или просто имеет случайный характер.

Таблица 1. Подробные сведения о проанализированных водородных связях.

Донор	Акцептор	Положение	Расстояние в РСА	% моделей ЯМР со связью	Расстояние в ЯМР		
					минимальное	максимальное	медиана
N LYS28	O ALA24	остовная в альфа-спирали	3,1	100	3,24	3,316	3,296
ND2 ASN15	OG SER19	между боковыми цепями в ядре белка	2,9	6,7	2,811	12,163	7,052
N GLN122	OD1 ASP120	в петле на поверхности глобулы	2,7	0	5,496	8,638	7,07

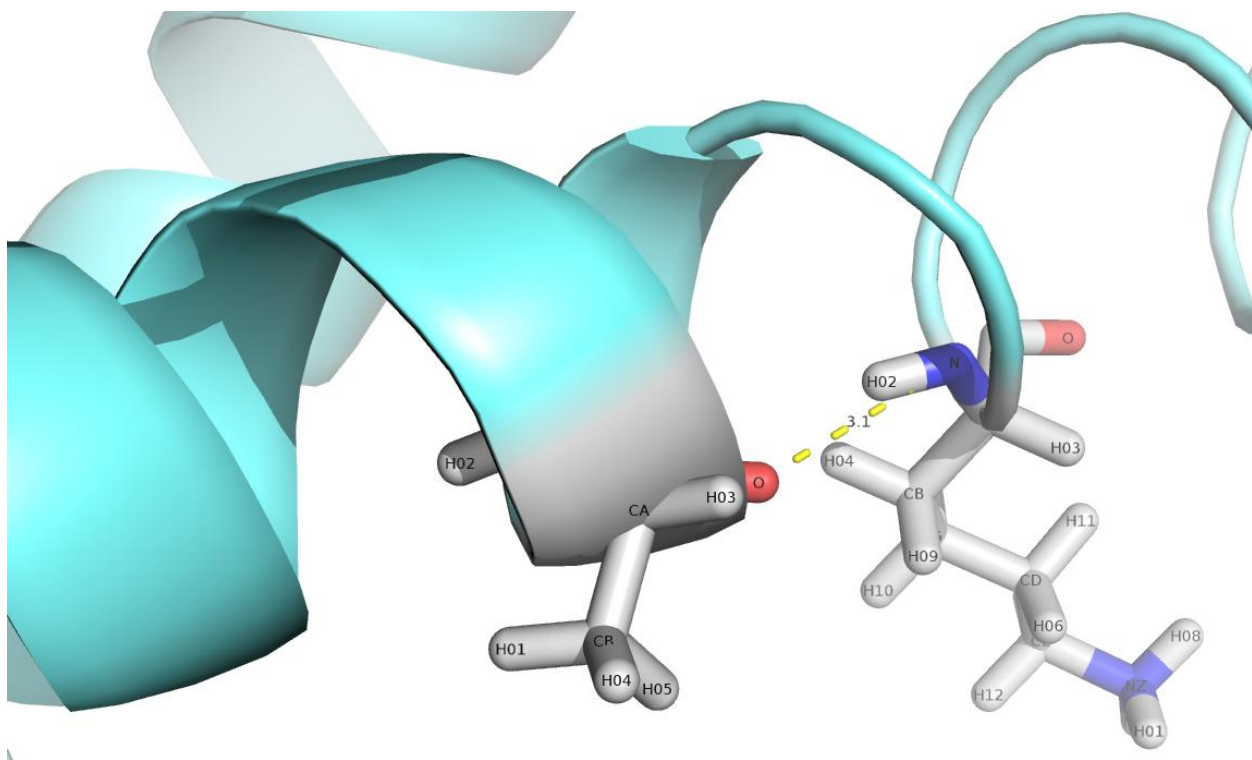


Рисунок 2. Остовная водородная связь в альфа-спирали.

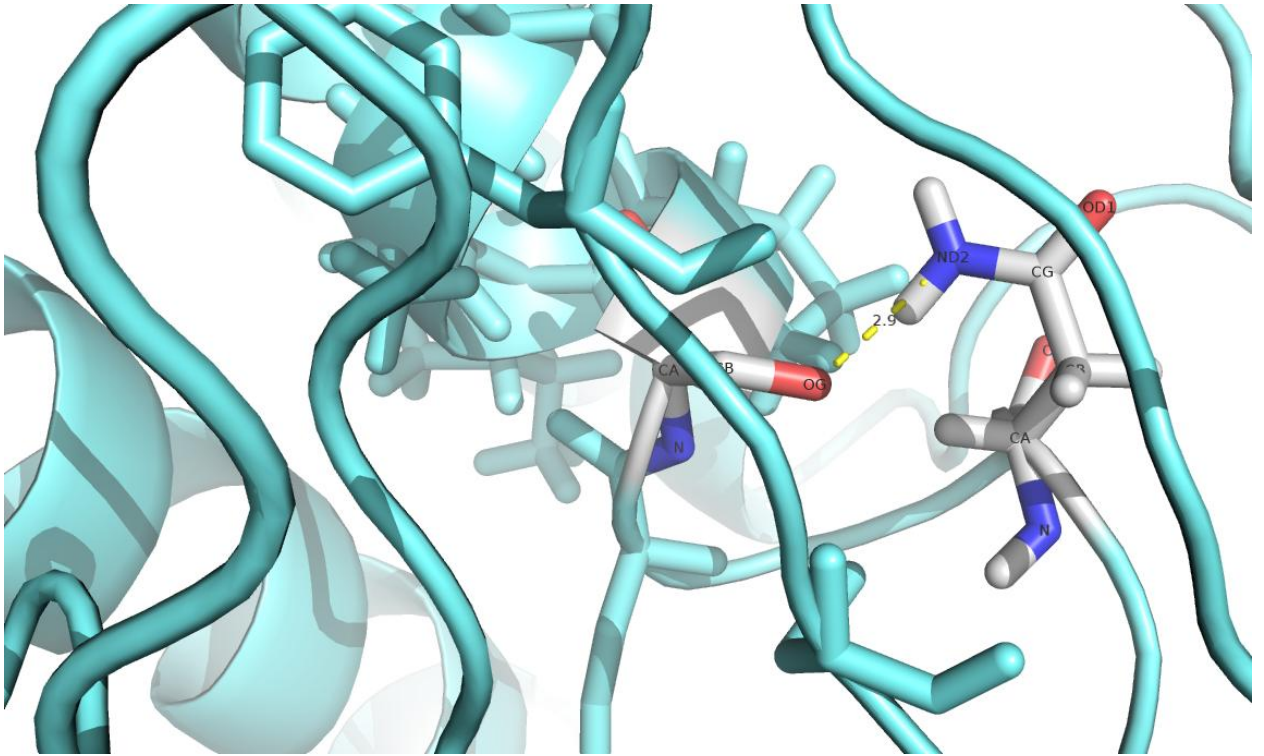


Рисунок 3. Водородная связь между боковыми радикалами в ядре белка.

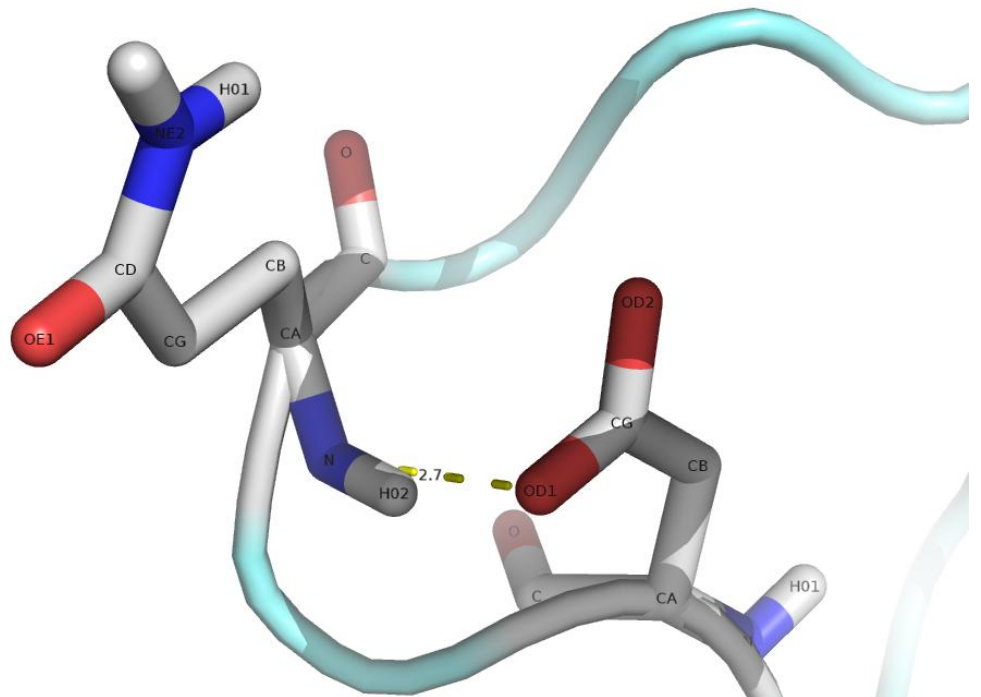


Рисунок 4. Водородная связь в петле на поверхности белка.