

# Определение вторичной структуры

Для предсказания вторичной структуры структуры белка репарации и рекомбинации RadA (идентификатор PDB 3NTU) на сервере kodomo была запущена программа DSSP с помощью команды:

```
mkdssp -i 3ntu.pdb -o 3ntu.dssp
```

Выдача программы: [3ntu.dssp](#)

Результаты предсказания вторичной структуры программой DSSP и сравнение с разметкой в PDB-файле приведены в таблице 1. В файле выдачи DSSP перечислены все остатки по порядку, и для каждого из них написана буква, обозначающая, к какой вторичной структуре он принадлежит. В файле PDB не так, там перечислены элементы вторичной структуры с указанием остатков, которые их формируют. Границы бета-листов в DSSP и PDB совпадают. Со спиральями получилось иначе: DSSP определяет границы каждой спирали на один остаток меньше с каждого края.

**Таблица 1.** Результаты определения границ элементов вторичной структуры программой DSSP.

Обозначение	Структура	DSSP	PDB
G	3-10 HELIX	5-7	4-8
H	ALPHA HELIX	13-21	12-22
H	ALPHA HELIX	27-31	26-32
H	ALPHA HELIX	35-39	34-40
H	ALPHA HELIX	46-59	45-60
H	ALPHA HELIX	68-74	67-75
H	ALPHA HELIX	85-90	84-91
H	ALPHA HELIX	111-121	110-122
H	ALPHA HELIX	156-166	155-167
H	ALPHA HELIX	170-175	169-176
H	ALPHA HELIX	185-193	184-194
E	STRAND	99-105	99-105
E	STRAND	143-149	143-149
E	STRAND	204-211	204-211