

Практикум 6

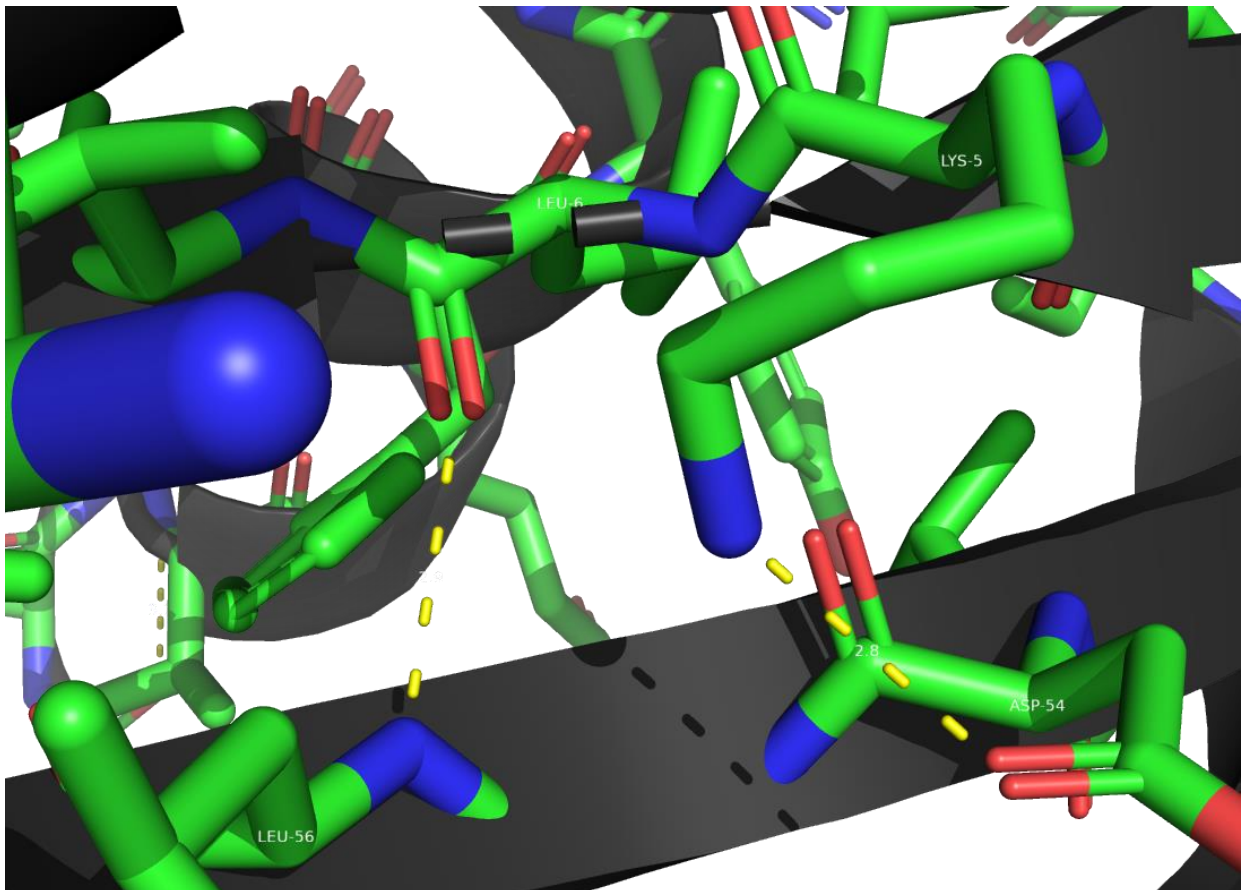
Задание 1

Для данного практикума мне досталась человеческая ГТФаза Ras, которая участвует во многих внутриклеточных каскадах, например, MAP-кинадном, запускаемых, в частности, Gs-белками и интегринами. Ras важна во многих процессах, таких как апоптоз, клеточный рост. Является онкогеном. Мутации в данном белке приводят к таким заболеваниям, как конгенитальная миопатия, синдрому Шиммельпеннинга–Фейерштейна–Мимса и Костелло, а также к раку мочевого пузыря и щитовидной железы.

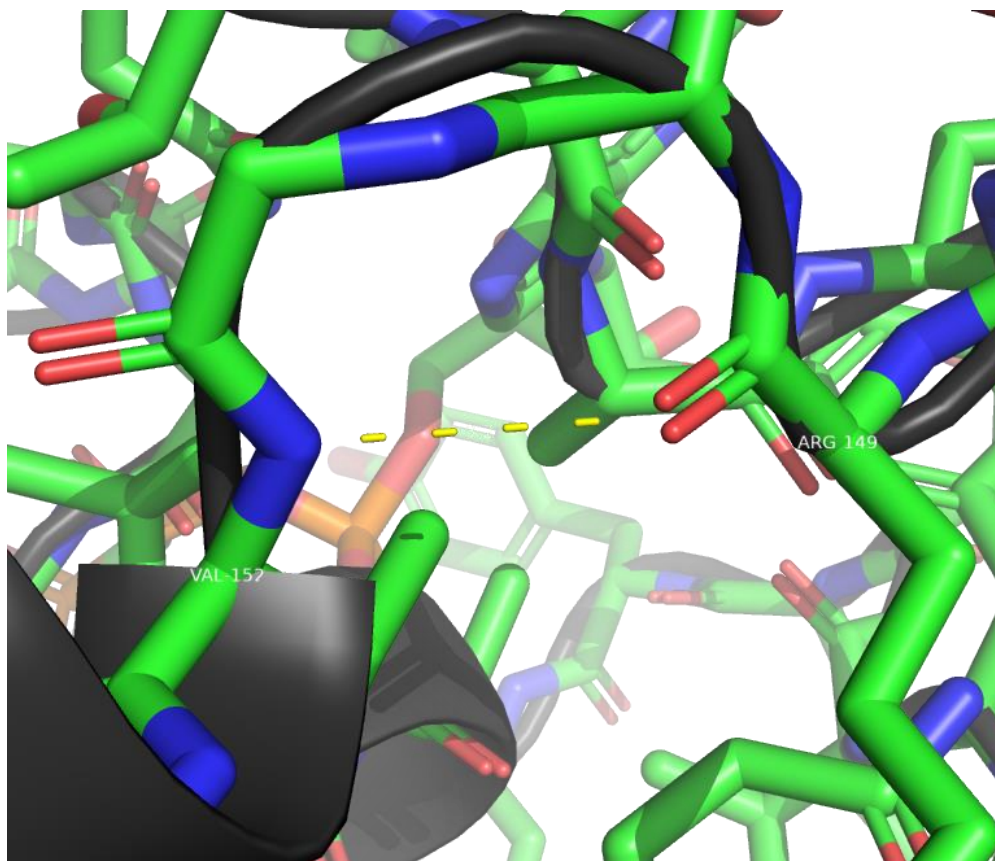
Структура 5ZC6 получена методом ЯМР, а 121P методом РСА.

Выбранная водородная связь - между атомами остова в ядре белка в бета-листе между кислородом лейцина-6 и азотом лейцина-56

Водородная связь боковых цепей в ядре белка выбрали между лизином-5 и кислородом D1 аспартата-54 (см. рисунок ниже)



Выбрана водородная связь в петле, выходящая на поверхность глобулы, между остовами валина-152 и аргинина-149.



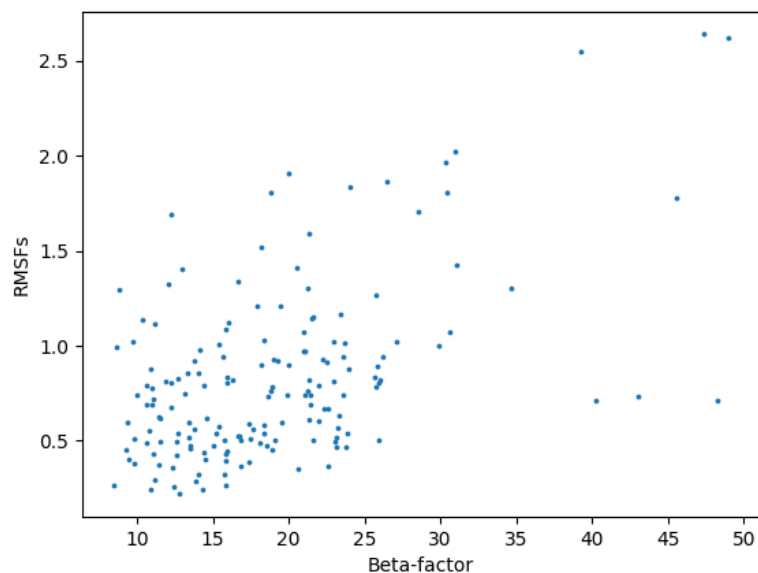
Водородная связь	Расстояние в РСА (Å)	Процент встречаемости в моделях ЯМР	Минимальное расстояние в моделях ЯМР (Å)	Максимальное расстояние в моделях ЯМР (Å)	Медианное значение в моделях ЯМР (Å)
Между остовами в бета-листе	2.9	100	2.5	2.9	2.613
Между боковыми радикалами в бета-листе	2.8	0	4.5	7.7	6.173
В петле	3.2	13.3	3	4.8	4.413

Итого, вероятно, что первая водородная связь существует, а две другие нет.

Задание 2

В данной задаче требуется сопоставить RMSF аминокислотных остатков записи PDB, полученной методом ЯМР, и значения B-факторов а.о. из модели PCA. Длина расшифрованных структур ЯМР и PCA совпадают.

Задание было выполнено в [Google Colab](#). Полученный график предоставлен ниже.



На графике заметна прямая линейная зависимость между RMSF и бета-фактором. Скудность точек в левом нижнем углу говорит о том, что большая часть белка стабильная и малоподвижная. Также несимметричность выбросов может объясняться большей частотой ошибок при определении расположения а.о. с высокой подвижностью.