

Практикум 2

Задание 1

Для этого задания мне были выданы две структуры бычьего трипсина - 3T28 (разрешения 2.80 Å) и 4I8H (разрешения 0.75 Å).

Выравнивание в PyMOL по C α -атомам показывает, что структуры отличаются слабо - ход остова практически одинаковый, но есть различия в конформациях некоторых остатков с длинными заместителями, такими как лизин.

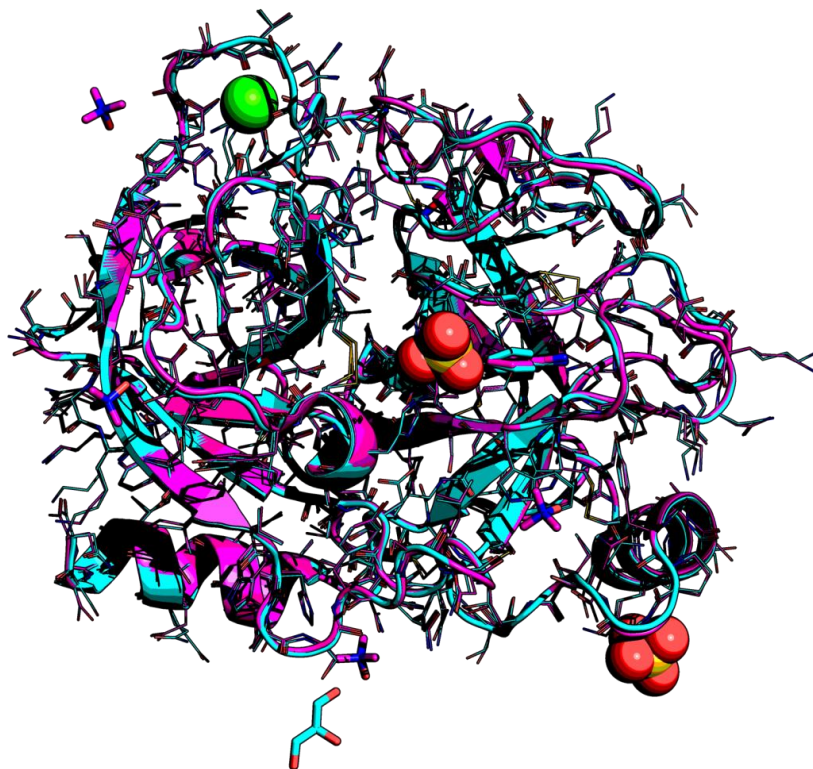


Рисунок 1: структурное выравнивание 3T28 и 4I8H

Покажем одно и то же место остова двух структур с наложенной электронной плотностью остова (level = 1, carve = 1.4). Я выбрала петлю, связывающую ион кальция, поэтому отобразила и его электронную плотность.

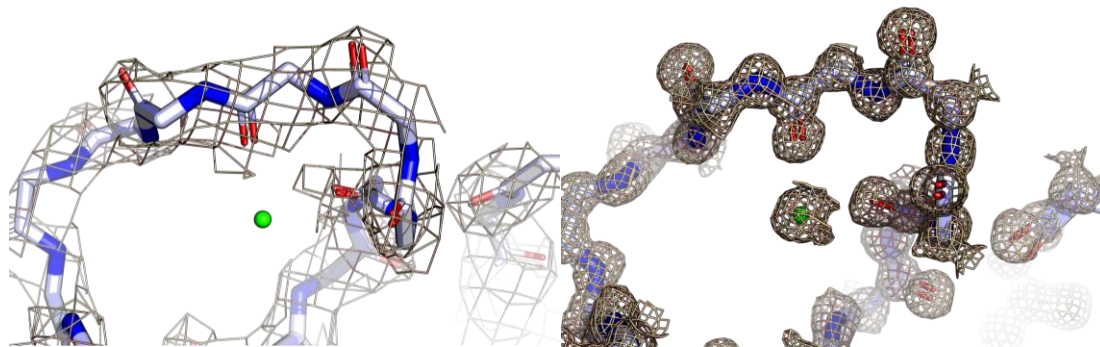


Рисунок 2: электронная плотность остова 3T28 и 4I8H соответственно

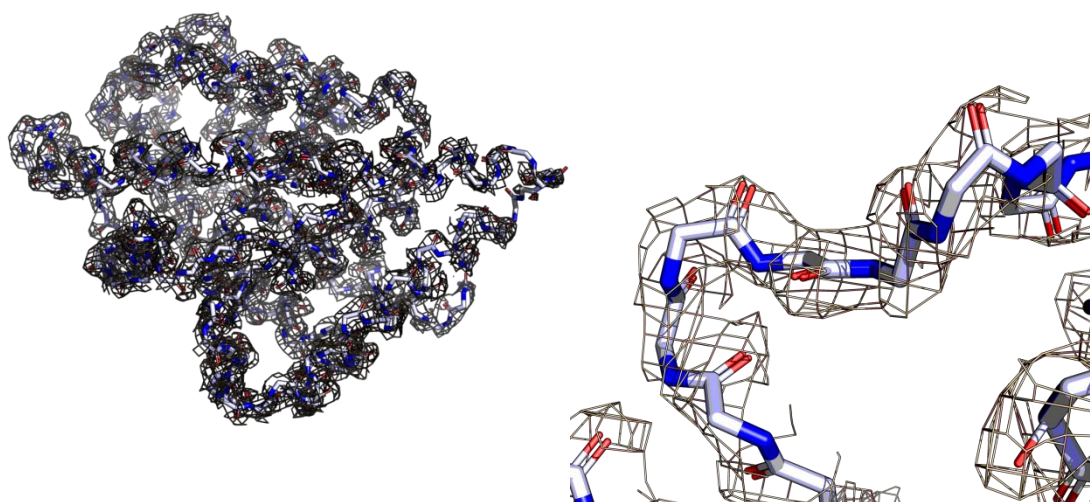
В обеих структурах плотность согласуется с положениями атомов, но в 4I8H по форме электронной плотности гораздо лучше прослеживаются отдельные атомы. Только в 4I8H видна электронная плотность вокруг иона кальция. Очевидно, что разрешение 4I8H выше, что согласуется с информацией из PDB.

Задание 2

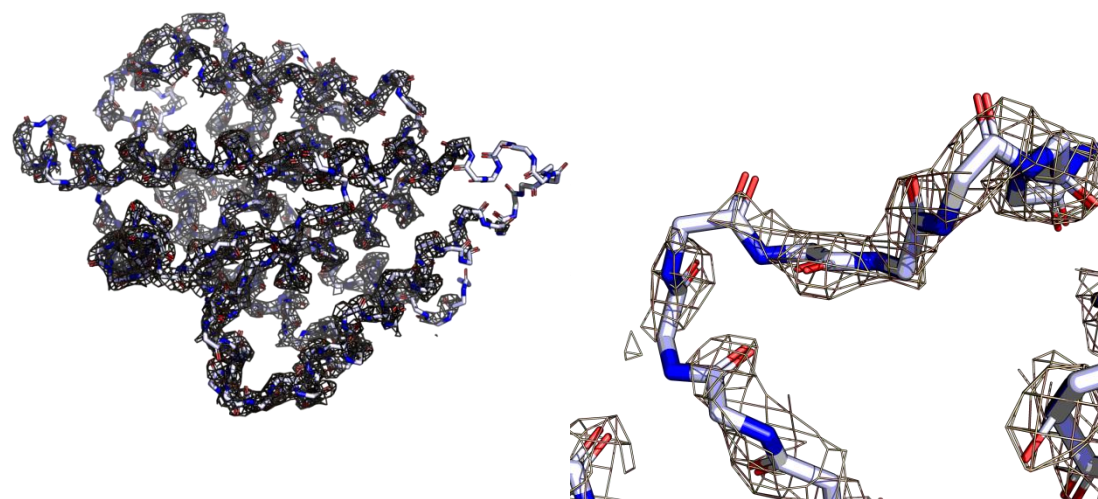
Рассмотрим андроген-связывающий белок (PDB ID 2PIQ). Построим карту электронной плотности с $\sigma_{cut} = 1.5$. Будем менять уровень подрезки (1, 2, 3). Покажем весь белок (слева) и фрагмент остова (справа) при разных её уровнях. Видно, что при увеличении уровня подрезки сперва перестают быть видны участки в петлях, которые выступают наружу от белка. Они слабо взаимодействуют с остальным белком. Дольше всего видны регионы около гидрофобного ядра белка.

Скорее всего, этот эффект связан с тем, что внешние петли сохраняют в кристалле большую подвижность, чем гидрофобное ядро, поэтому их электронная плотность более размытая, из-за чего плотность электронов уменьшается.

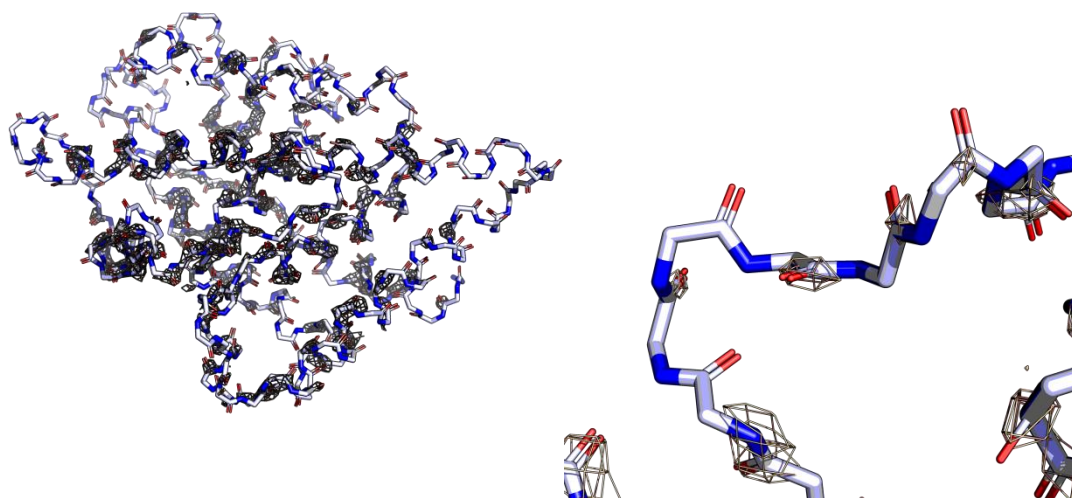
На уровне остовов отдельных остатков дольше всего видны карбонильные атомы углерода.



Уровень подрезки 1



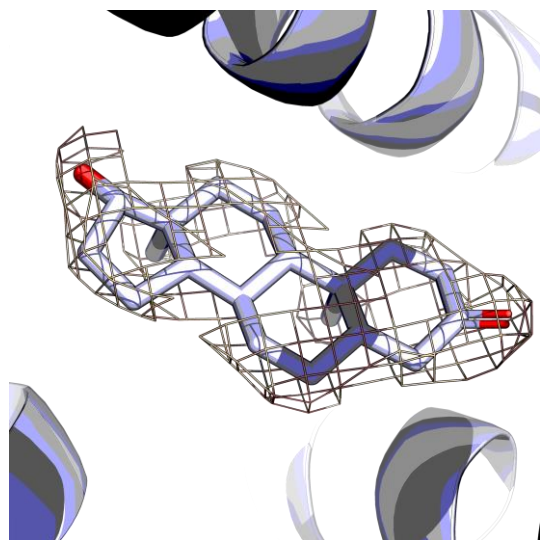
Уровень подрезки 2



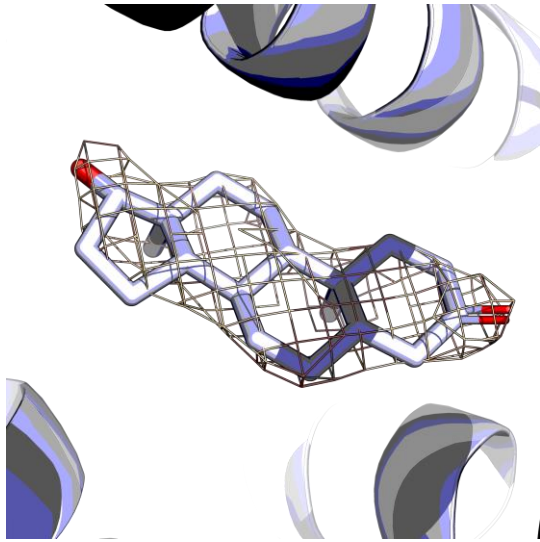
Уровень подрезки 3

Задание 3

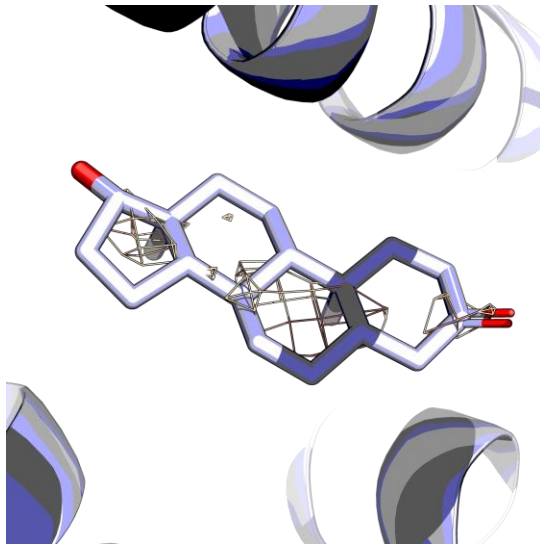
В этой же структуре присутствует лиганд 5 α -дигидротестостерон. Покажем его на тех же уровнях подрезки 1, 2 и 3. На уровне подрезки электронная плотность покрыты только наиболее замещённые атомы углерода (которые с четырьмя заместителями) и атом углерода карбонильной группы. Покрытие лиганда электронной плотностью уменьшается при увеличении уровня подрезки, при этом лучше сохраняются более разветвлённые участки молекулы, что может быть связано с тем, что в этих местах электронная плотность больше.



Уровень подрезки 1



Уровень подрезки 2



Уровень подрезки 3