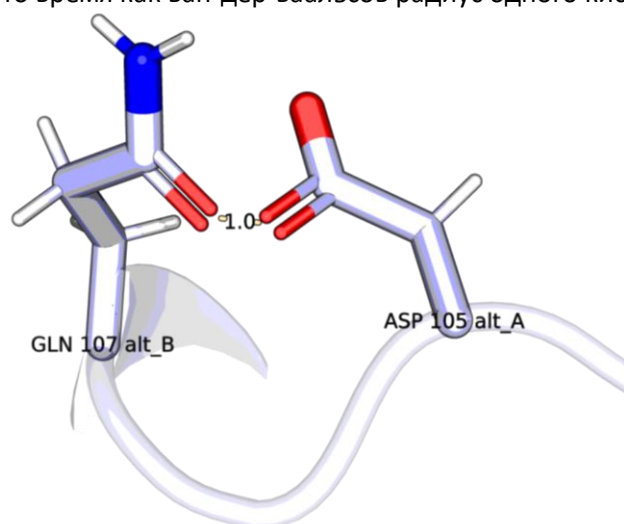


Практикум 3

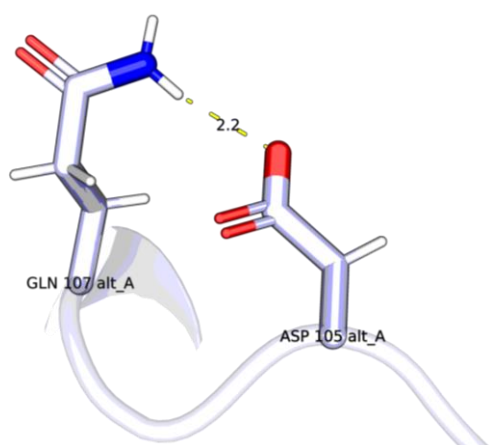
Задание 1 (Вариант А)

Мне была выдана структура одного белка SARS-CoV-2 (PDB ID 7KR0).

В данном задании надо рассмотреть в белке альтернативные конформации аспартата 105 и глутамина 107. Они имеют по два альт-лока А и В. Пара А:105:ASP с В:107:GLN невозможна, так как тогда атомы кислорода боковых цепей сблизятся на 1 ангстрем, в то время как ван-дер-ваальсов радиус одного кислорода 1.5 ангстрема.



Пара А:105:ASP и А:107:GLN, видимо, наиболее стабильная, так как в ней остатки образуют водородную связь при депротонированном кислороде аспартата. Это наблюдение согласуется с большей заселённостью у пары А - 0.6.



Задание 2

В-фактор отражает степень подвижности участка белковой молекулы, так как в более подвижных областях электронная плотность сильнее размывается в пространстве. Если посмотреть на раскраску по В-фактору остова, больше всего его значение на концах белка, так как они не закреплены и больше болтаются. Поменьше В-фактор просто на выступающих в воду участках петель, так как они не особо зафиксированы взаимодействиями с другими частями белка. Самые низкие значения В-фактора там, где остатки прочно взаимодействуют друг с другом, находятся в элементах вторичной структуры (спиралях, листах) или в гидрофобном ядре белка.

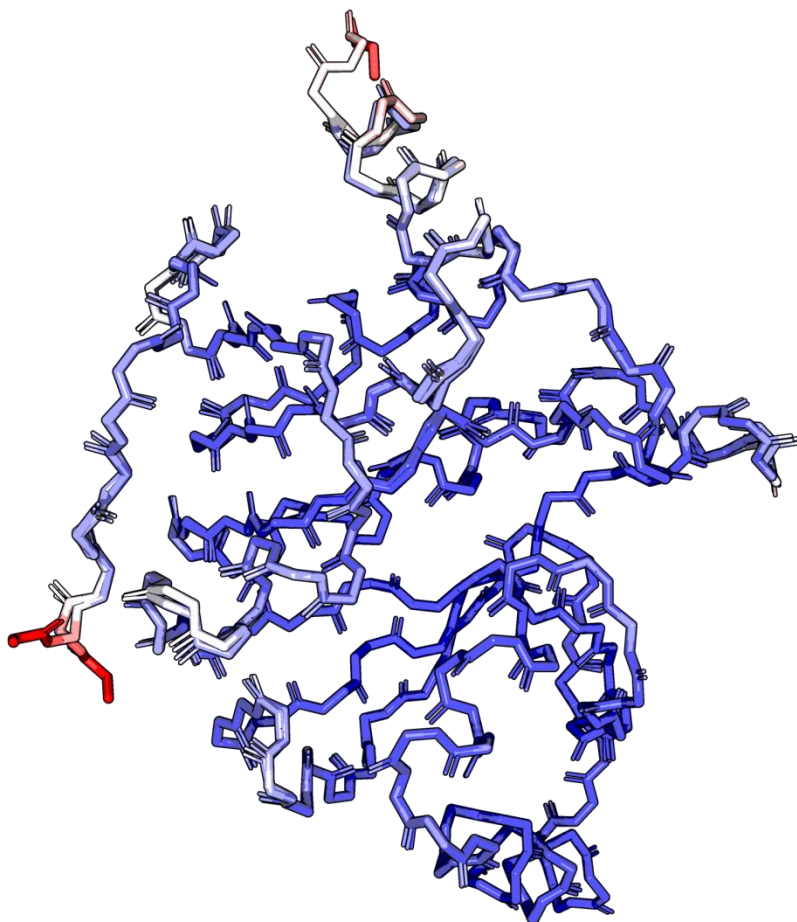


Рисунок 3: остов белка, раскрашенный по B-фактору (низкий синим, высокий красным).

Если рассмотреть остаток с длинной боковой цепью, например аргинин-148, у него B-фактор будет увеличиваться по направлению к периферии, так как чем дальше атом к концу боковой цепи, тем сильнее он может смещаться в пространстве. При этом ЭП также быстрее исчезает при увеличении уровня подрезки на более периферийных атомах. Это связано с тем, что чем выше B-фактор, тем больше дисперсия электронной плотности и ниже плотность в её центре.

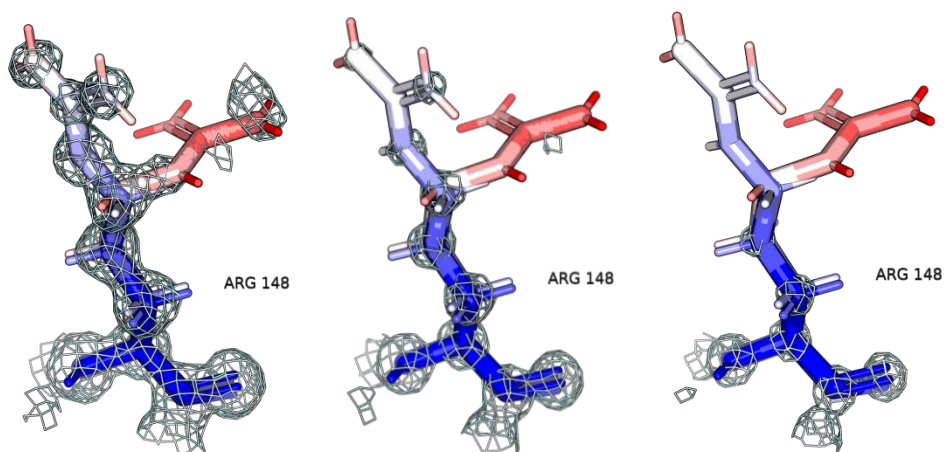


Рисунок 4: аргинин-148, раскрашенный по значениям B-фактора (синий низким, красный высоким) с ЭП на уровнях подрезки 1, 2 и 3 соответственно.

Задание 3

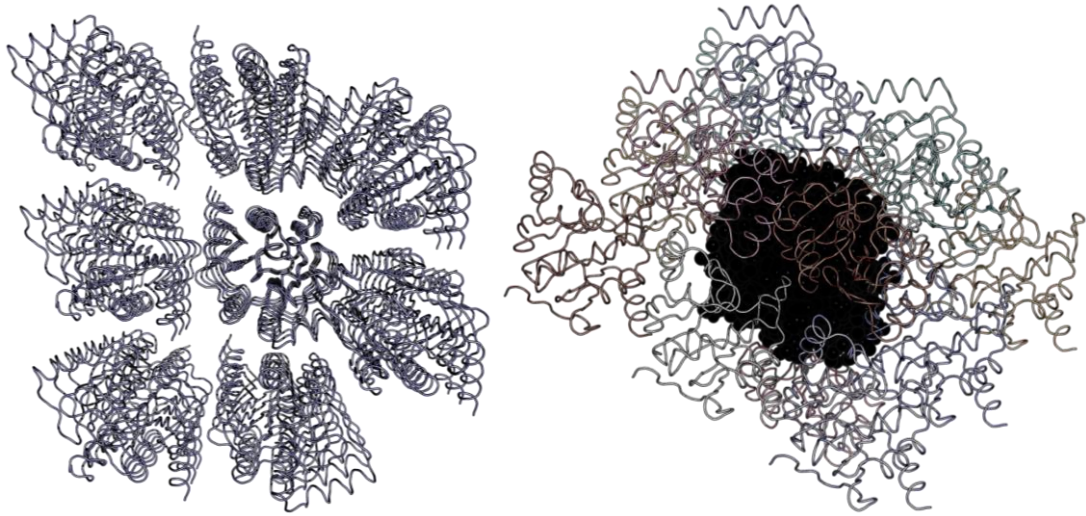


Рисунок 5: кристаллическая структура белка; белок и 12 соседей белка в кристаллической решётке.