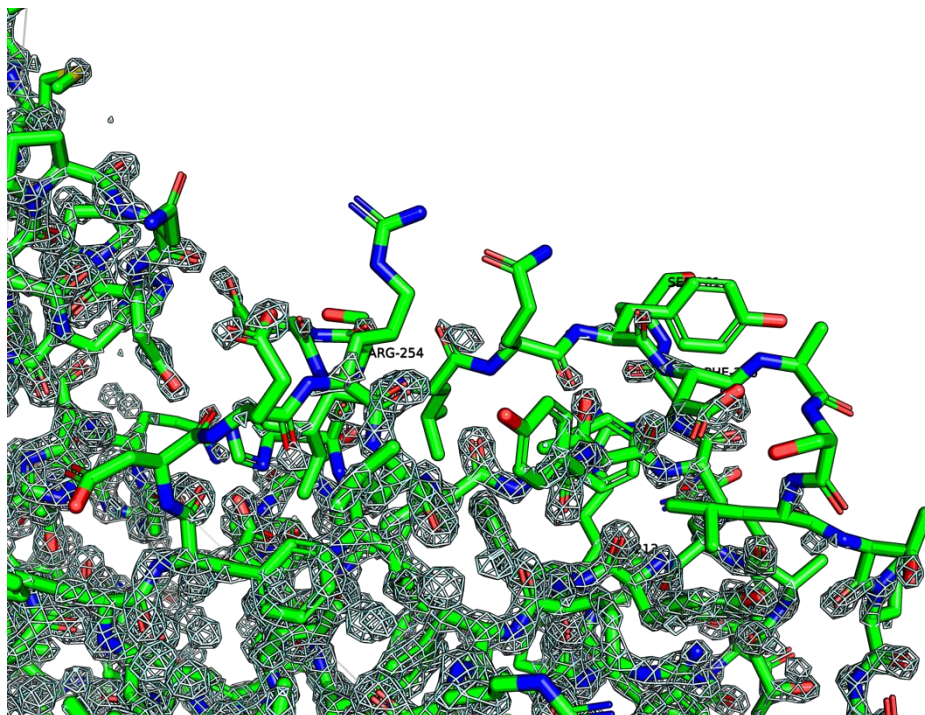


# Практикум 4

## Задание 1

Для моей структуры 1JD0 разрешение 1.50 Å, R-Value Free: 0.207, R-Value Work: 0.190, R-Value Observed: 0.190.

Непокрытые участки имеются, например, с ARG213, ARG254, TYR40, SER261, PHE260, GLN39 в цепи В. Но судя по данным из Uniprot, они не являются значимыми (там аннотировано всего 4 остатка, они другие).



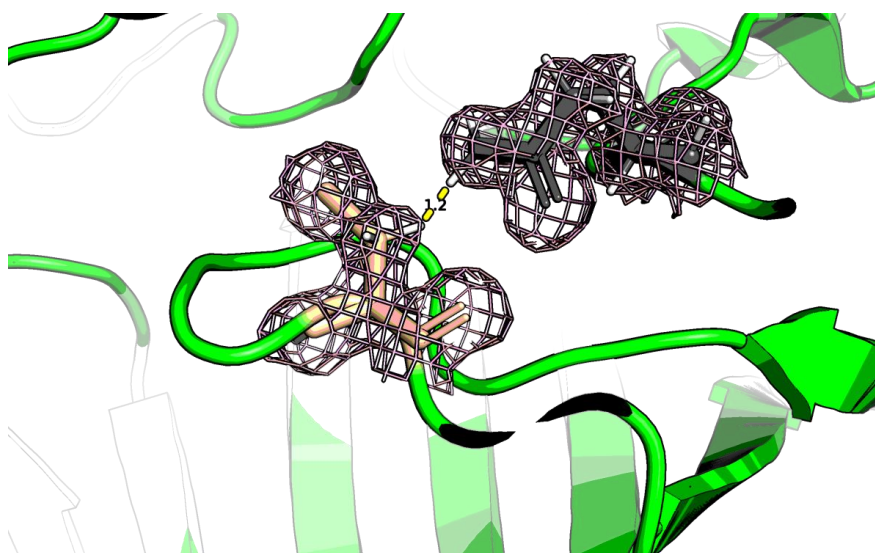
Альтернативных структур для данного участка изучаемого белка нет, поскольку порядка 30 других структур практически идентичны 1JD0.

Для изучения внеклеточного домена карбоангидразы 12 данная структура может использоваться, но не для всего белка, поскольку в 1JD0 нет трансмембранного и внутриклеточного домена на С-конце белка.

## Задание 2

Выбрала 5 маргинальных аминокислотных остатков, которые были таковыми и в PDB, и в Molprobity.

1, 2) Из списка слишком близких контактов: В:28:GLN (серый) и В:203:CYS (бежевый).



Действительно, расстояние между двумя водородами этих аминокислот 1,2 ангстрема, в то время как Ван дер Ваальсов радиус для водорода 1,2 ангстрема. Видимо, тут имеется ошибка в вычислении ЭП.

3, 4) Аутлайеры по углу  $\chi_1$ : A:158:ASP и B:158:ASP, неточность расшифровки PCA объясняется подвижностью аспартата на поверхности белка.

5) Аутлайер по углам  $\psi$  и  $\phi$ : B:252:ASP, неточность расшифровки PCA также объясняется подвижностью аспартата на границе глобулы белка со внешней средой.

Итого, для всех пяти маргинальных остатков имеется ошибка в расшифровке ЭП, но так как для трёх из них ошибка ожидаема ввиду расположения на поверхности белка, а всего во всей структуре маргинальных остатков 13, модель структуры вполне приемлема для изучения, в частности, взаимодействия с субстратом.