

Восстановление кристалла из PDB файла

1. Кристаллическая ячейка

Структура - 1RDQ

Кристаллографические характеристики:

CRYST1 57.760 79.513 97.739 90.00 90.00 90.00 P 21 21 21 4

Длины направляющих векторов ячейки: $a = 57.760$, $b = 79.513$, $c = 97.739$;

Углы между направляющими векторами: $\alpha = 90.00^\circ$, $\beta = 90.00^\circ$, $\gamma = 90.00^\circ$;

Кристаллографическая группав символикe Германа-Могена: P 2₁ 2₁ 2₁;

Число молекул в ячейке: 4.

Исходя из этих данных ячейку можно описать следующим образом: Ромбическая кристаллическая система ($a \neq b \neq c$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$); Точечная группа класса 222.

(http://ahrenkiel.sdsmt.edu/courses/Spring2016/NANO704/International_Tables_For_Crystallography_A.pdf)

Ассиметрическая единица = биологическая единица.

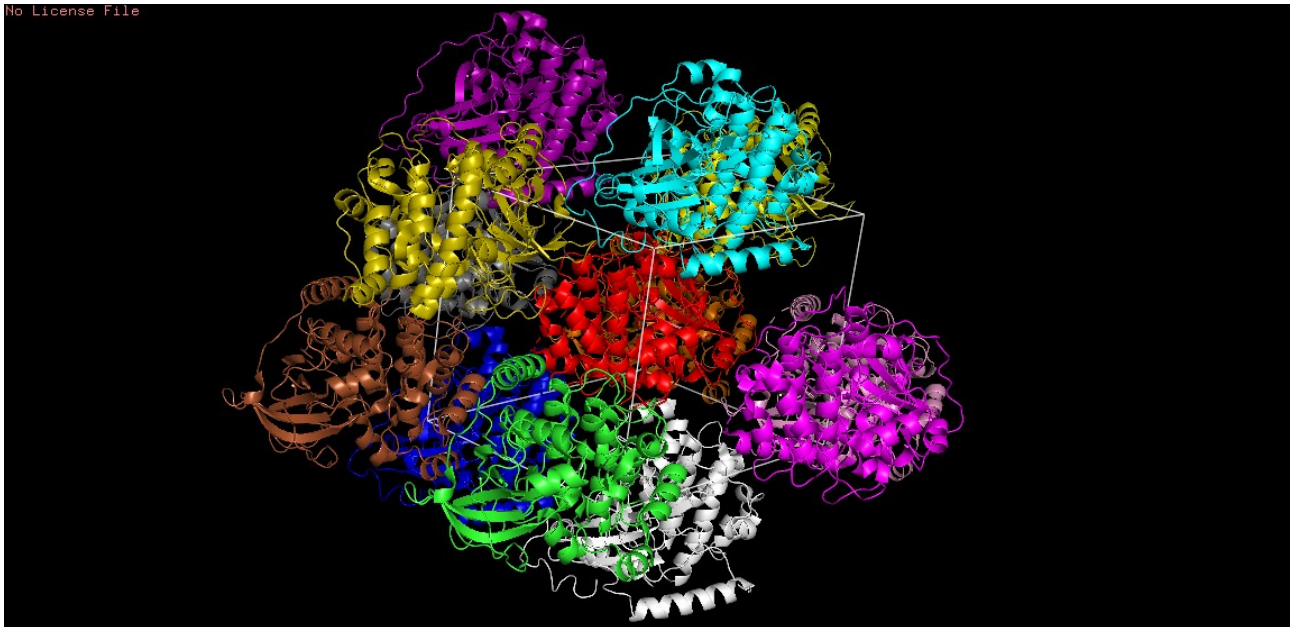


Рис 1. Разными цветами обозначены разные ассиметрические единицы; обозначены границы элементарной ячейки (расстояние - 12А).

Зоны контакта между белками

Были построены водородные связи (до 3.5 ангстрем) между красной и суан (Рис 2).

Видно, что между двумя гетеродимерами из соседних ячеек довольно много водородных связей (до 3,5 А) и водных мостиков. Я полагаю, что они отображают природные взаимодействия, поскольку протеинкиназа А - тетрамер, состоящий из двух гетеродимеров (здесь вместо регуляторной субъединицы — ингибиторный протеин). Это предположение в

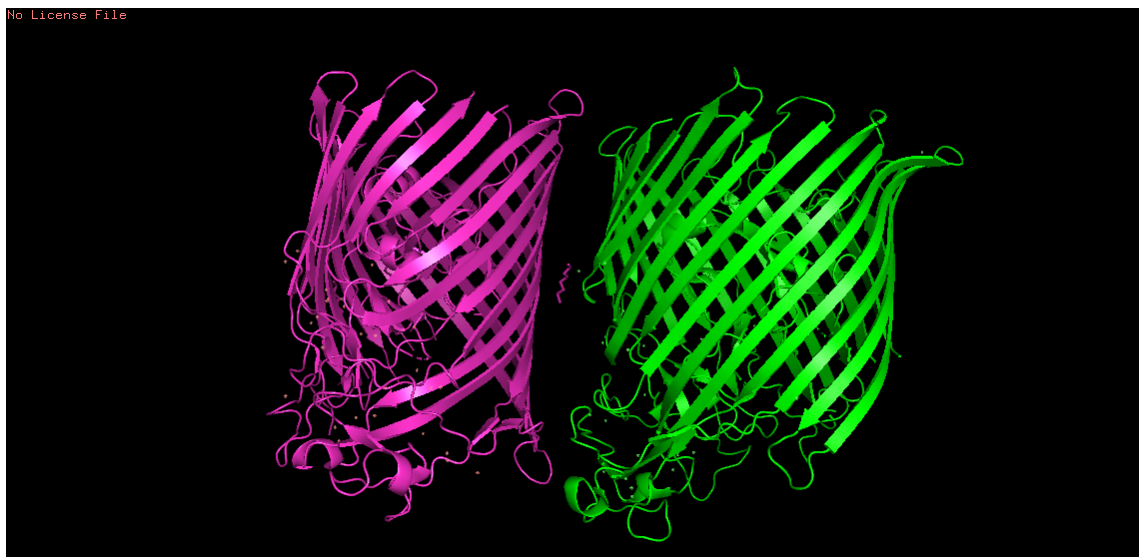


Рис 5а. Ассиметрическая единица 5NEC

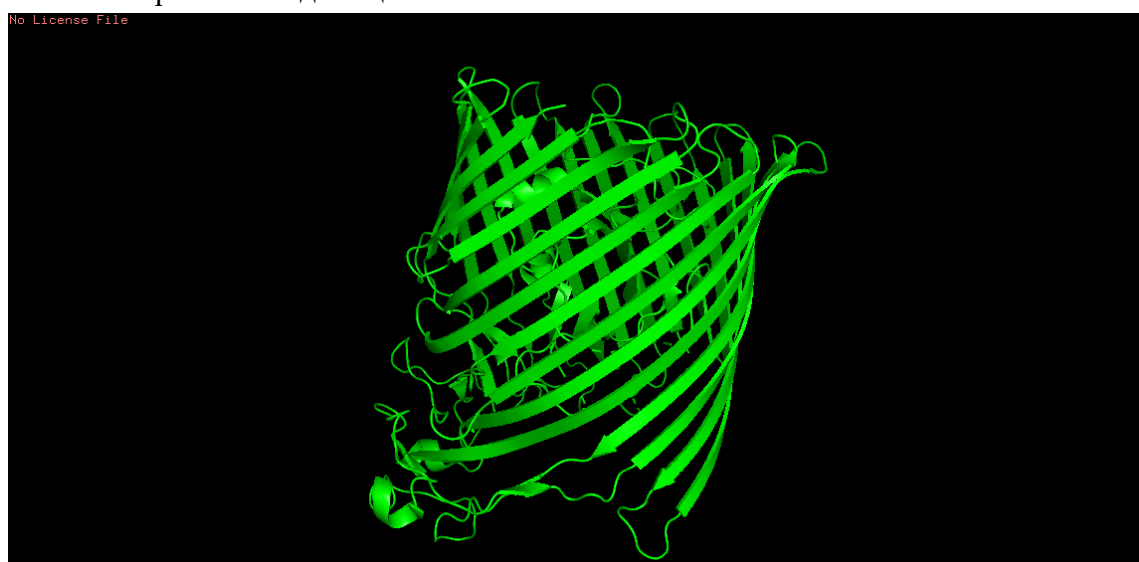


Рис 5б. Биологическая единица 5NEC

6c8z - Ассиметрическая единица (Рис 6а) - мономер, биологическая (Рис 6б)— гомодимер.

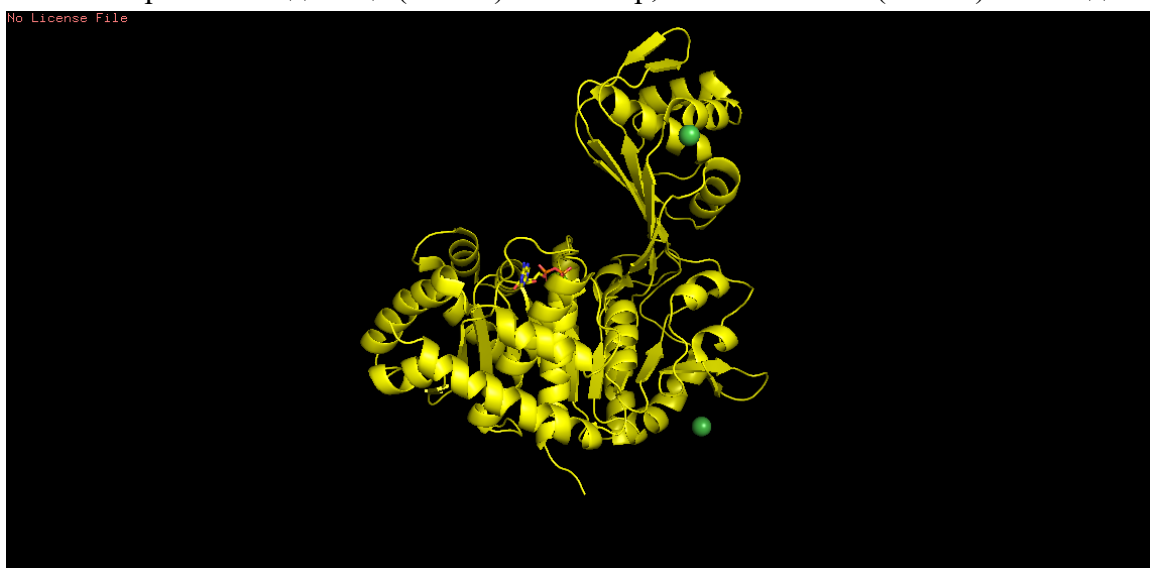


Рис 6а. Ассиметрически единица 6C8Z

No License File

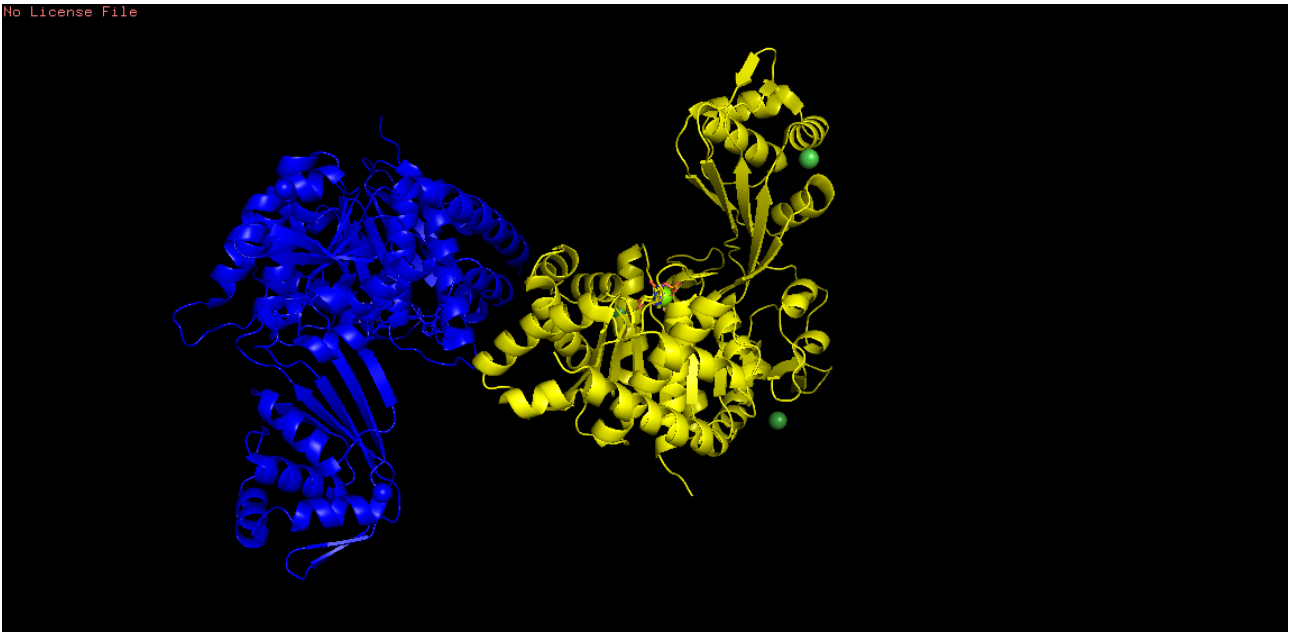


Рис 6б. Биологическая единица 6C8Z