

Анализ ЯМР-структур

Был взят белок L30e большой (50S) субъединицы рибосомы *Thermosoccus celer*.
Структуры: ЯМР - [1GO0](#), 10 структур; РСА - [1H7M](#), разрешение - 1,96Å.

1. Совмещение структур

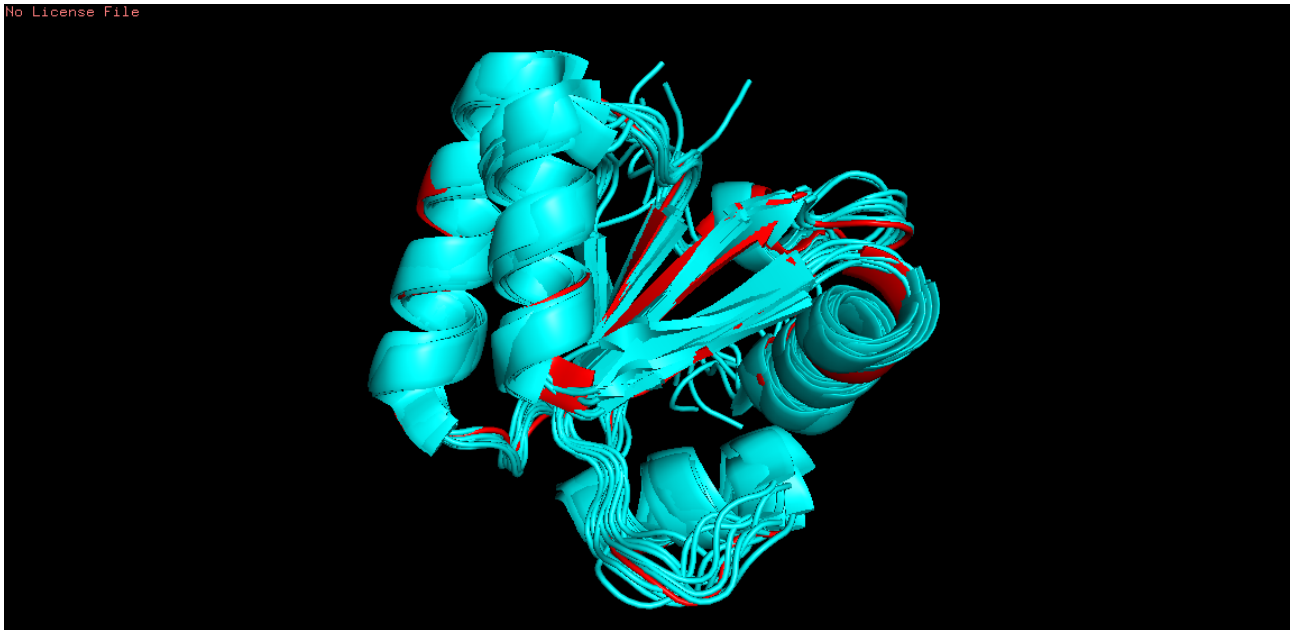


Рис 1. Наложение структуры, полученной РСА (красная) и 10 структур, полученных ЯМР (саян)

Структуры хорошо совмещаются.

2. Выбор водородных связей (НВ) в РСА структуре

Основная НВ в β -листе внутри глобулы между ALA-84(N) и VAL-17(O) (Рис 2)

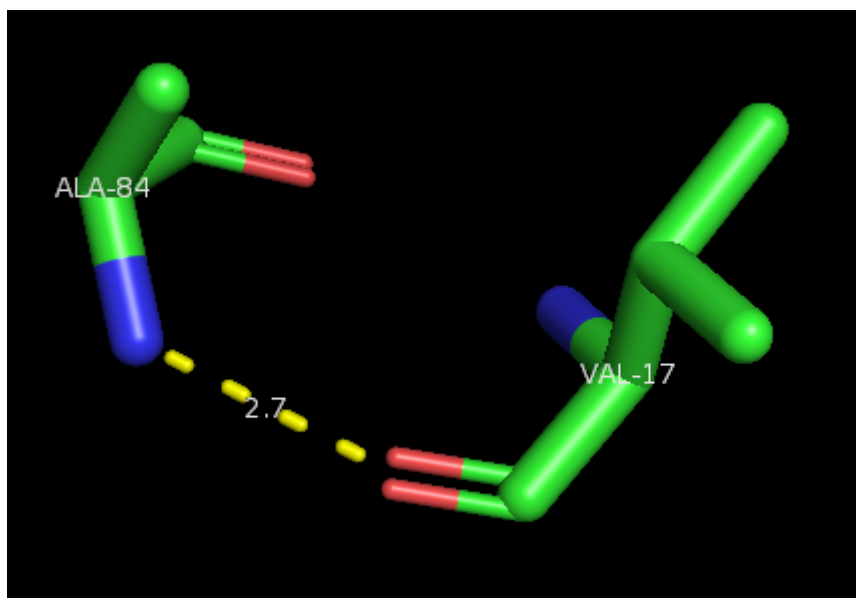


Рис 26. НВ в бета-листе на уровне двух остатков

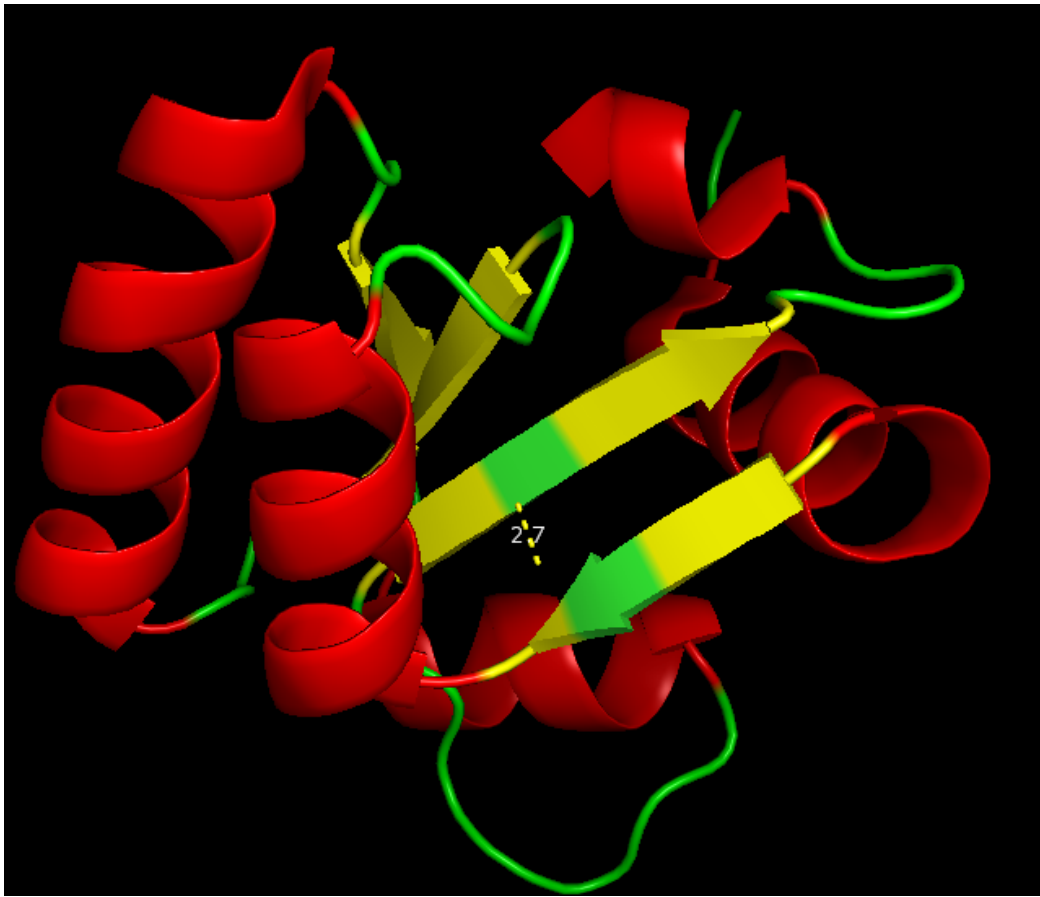


Рис 2а. НВ в бета-листе на уровне полной структуры

НВ внутри белка между боковыми цепями GLU-62 (OE2) и LYS-46 (NZ) (Рис 3)

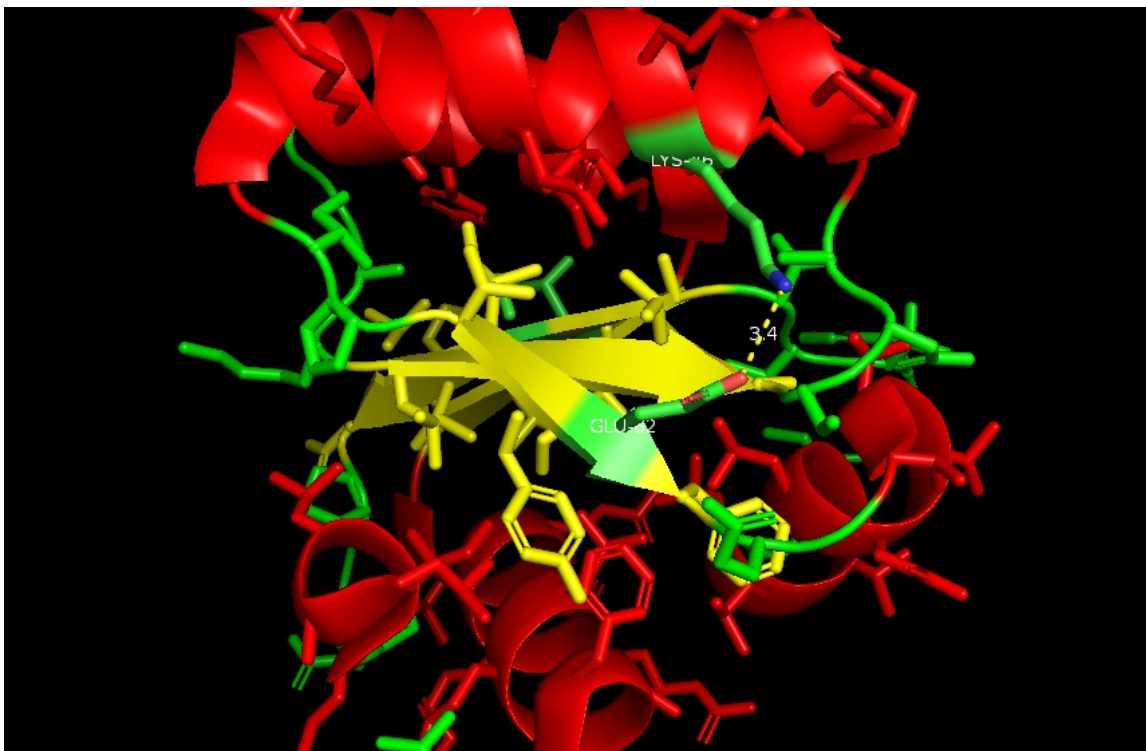


Рис 3а. НВ между боковыми цепями на уровне полной структуры

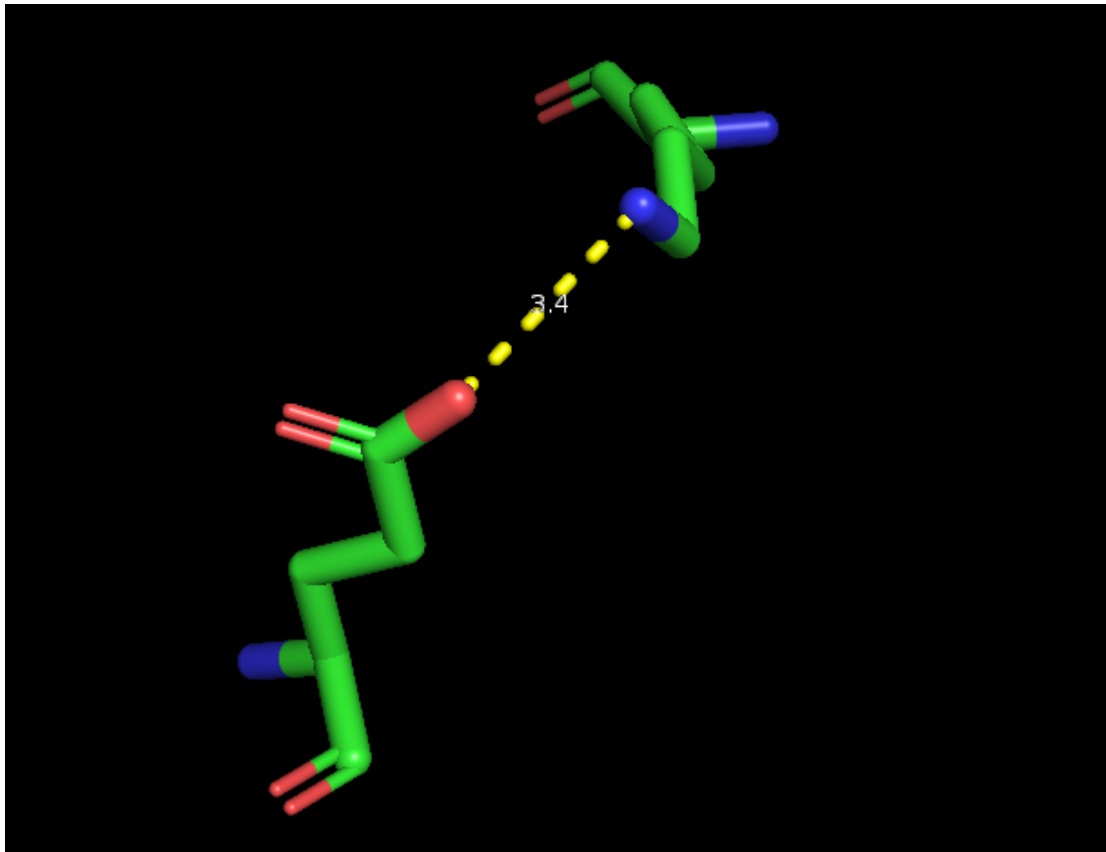


Рис 3б. НВ между боковыми цепями на уровне двух остатков

НВ на поверхности белка между ARG-76(N) петли и GLY-71(O) α -спирали (Рис 4)

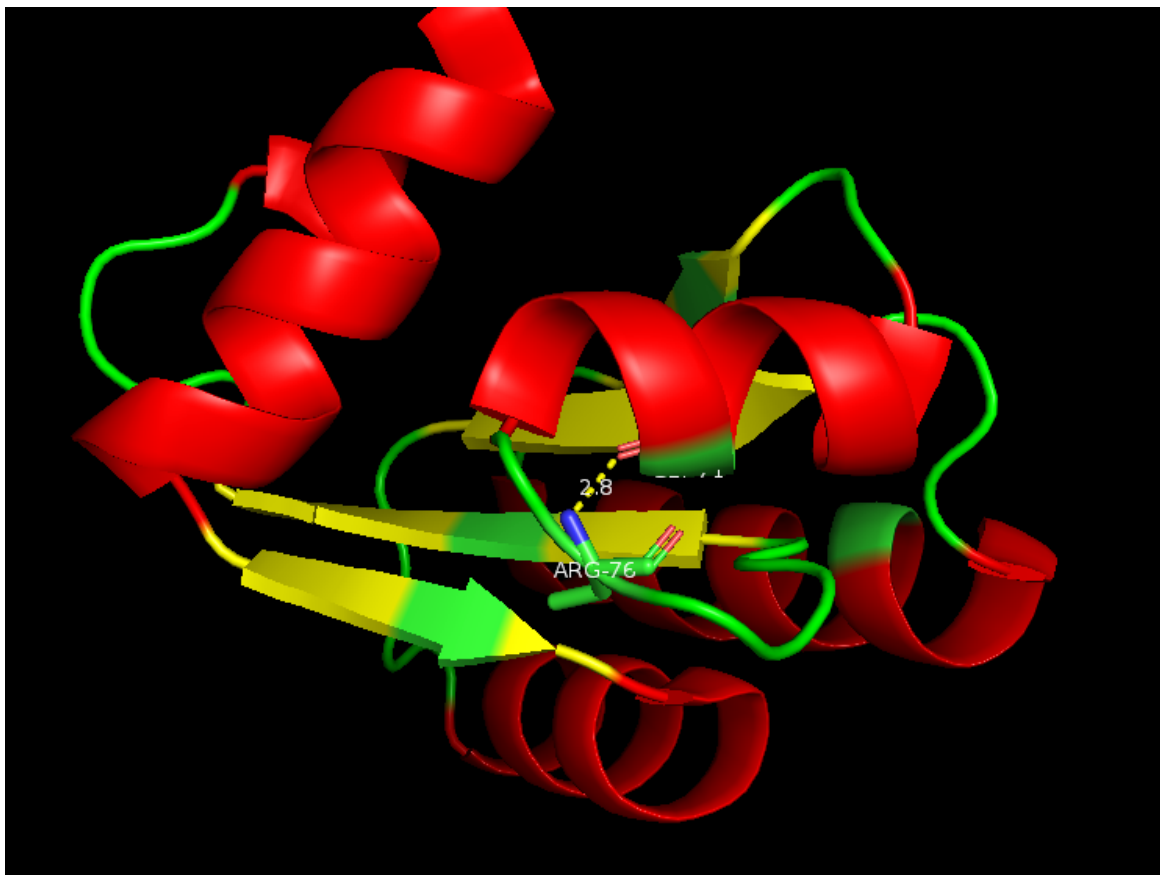


Рис 4а. НВ на поверхности белка на уровне полной структуры

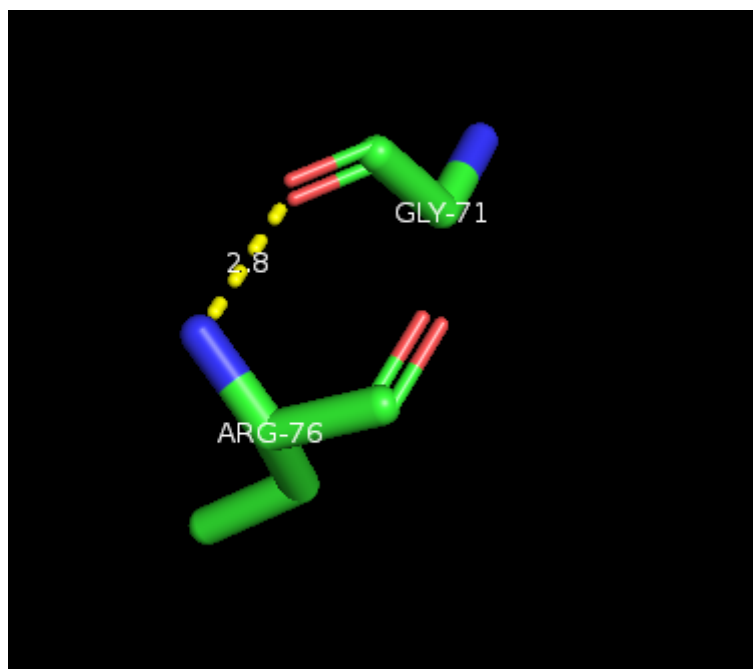


Рис 46. НВ на поверхности белка на уровне двух остатков

3. Поиск этих НВ в ЯМР-структурах

Связь	Расстояние между атомами в РСА,	Минимум расстояний в ЯМР	Медиана расстояний в ЯМР	Максимум расстояний в ЯМР	Встречаемость в моделях ЯМР, число структур	Встречаемость в моделях ЯМР, %
ALA-84(N) - VAL-17(O)	2.7	1.8	1.8	2.0	10	100%
GLU-62 (OE2) - LYS-46 (NZ)	3.4	1.6	1.7	2.4	4	40%
ARG-76(N) - GLY-71(O)	2.8	1.8	2.0	2.2	5	50%

1) Остовные водородные связи (в бета листе), имеющиеся в РСА структуре имеются во всех ЯМР структурах, но длины связей различаются (как от РСА структуры, так и между собой).

Водородные связи боковых цепей ядра и боковых цепей на поверхностях уже имеются не во всех ЯМР структурах (длины тоже различны).

2) Длины связей между боковыми цепями в ЯМР имеют больший разброс, чем длины остовных связей.

Пункт 1 можно объяснить тем, что поскольку при ЯМР молекулы находятся в растворе, они (и их части) более динамичны, чем молекулы в кристалле при РСА. Поэтому расстояния между донорами и акцепторами одних и тех же связей различаются в кристаллах, полученных разными методами. Эти расстояния могут становиться больше 3.5Å, в результате чего водородные связи не образуются.

Пункт 2 объясняется тем, что боковые цепи более подвижны, чем остов.