

Построение и анализ поверхностей в PyMOL

Была взята ЯМР-структура [2W84](#) комплекса Rex14 с Rex5, содержащая 2 белковых цепи и 10 ЯМР-моделей.

1. Построение молекулярной поверхности

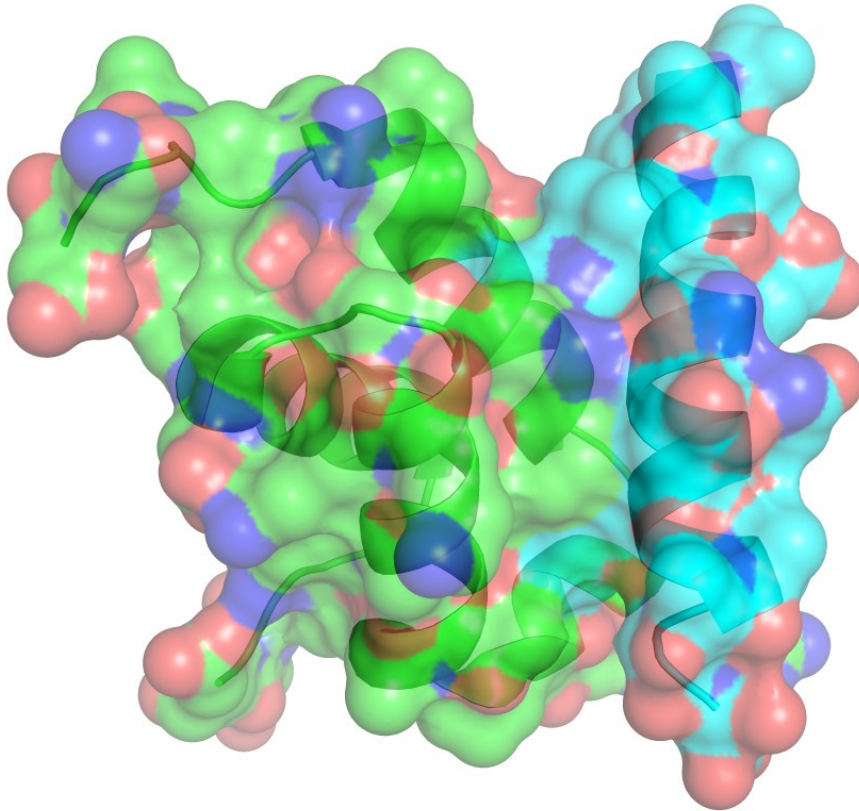


Рис1. Молекулярная поверхность 2W84 на фоне её cartoon модели.

2. Расчет площадей молекулярных поверхностей (MS) и поверхностей, доступных для растворителя (SAS) каждой модели

Таблица 1. Значения площадей MS и SAS для всех моделей 2W84.

Модель	MS, Å ²	SAS, Å ²
1	7715.579	5298.584
2	7665.348	5496.489
3	7687.168	5601.300
4	7692.915	5429.430
5	7733.019	5436.753
6	7688.546	5628.701
7	7712.564	5509.478

8	7713.486	5520.241
9	7709.802	5579.960
10	7726.700	5563.968

MS меняется от модели к модели не так сильно, как меняется SAS.

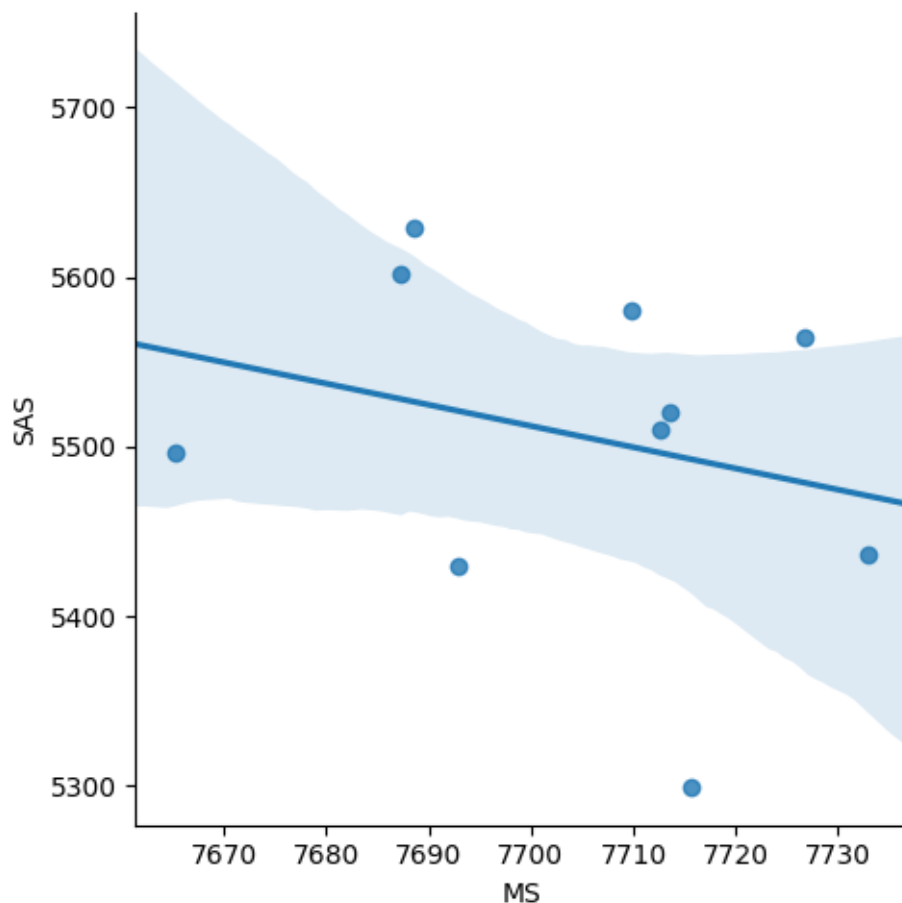


Рис3. Зависимость (Implot) SAS от MS для моделей 2W84.

Сложно говорить о наличии линейной зависимости между SAS и MS (наклон графика почти горизонтальный, точки сильно разбросаны). При увеличении MS SAS может как возрастать, так и падать, хотя интуитивно кажется, что должна лишь возрастать. Возможно, это связано с тем, что при движении молекулы могут образовываться полости и карманы, которые увеличивают MS, но в которые не может проникнуть растворитель.

3. Межцепочечные контакты

В качестве контактирующих остатков выбраны атомы в пределах 3.5 Å.

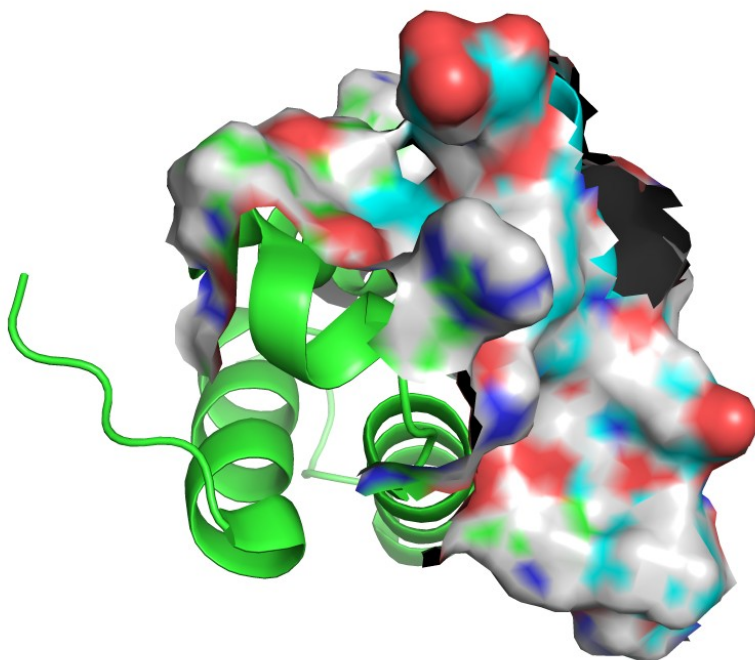


Рис4. Поверхность контакта без разделения цепей.

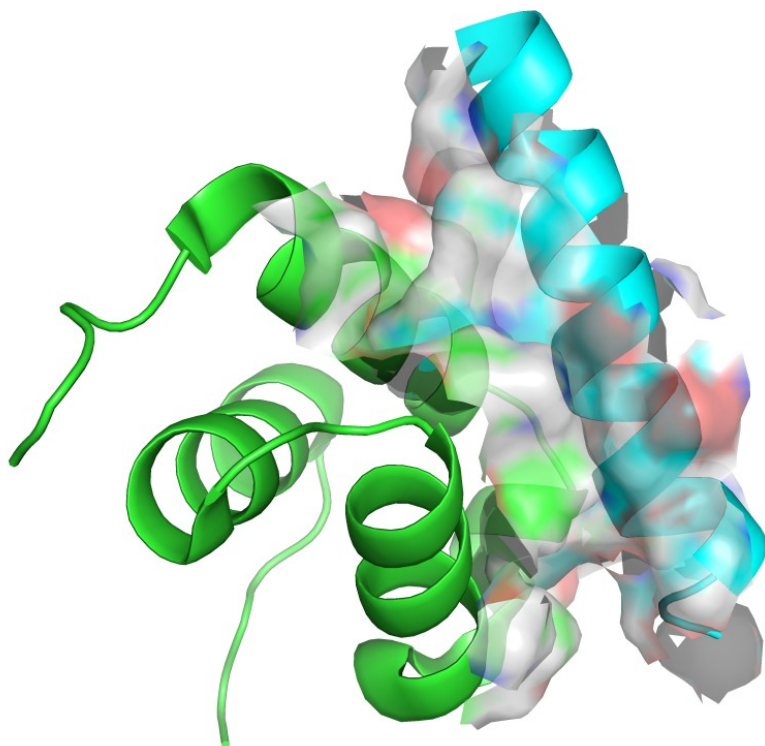


Рис5. Поверхность контакта с разделением цепей (extract).

Лучше использовать предварительное разделение цепей. На картинке без разделения видно, что были построены поверхности в том числе для тех частей цепи В, которые смотрят наружу и никак не могут касаться цепи А.