

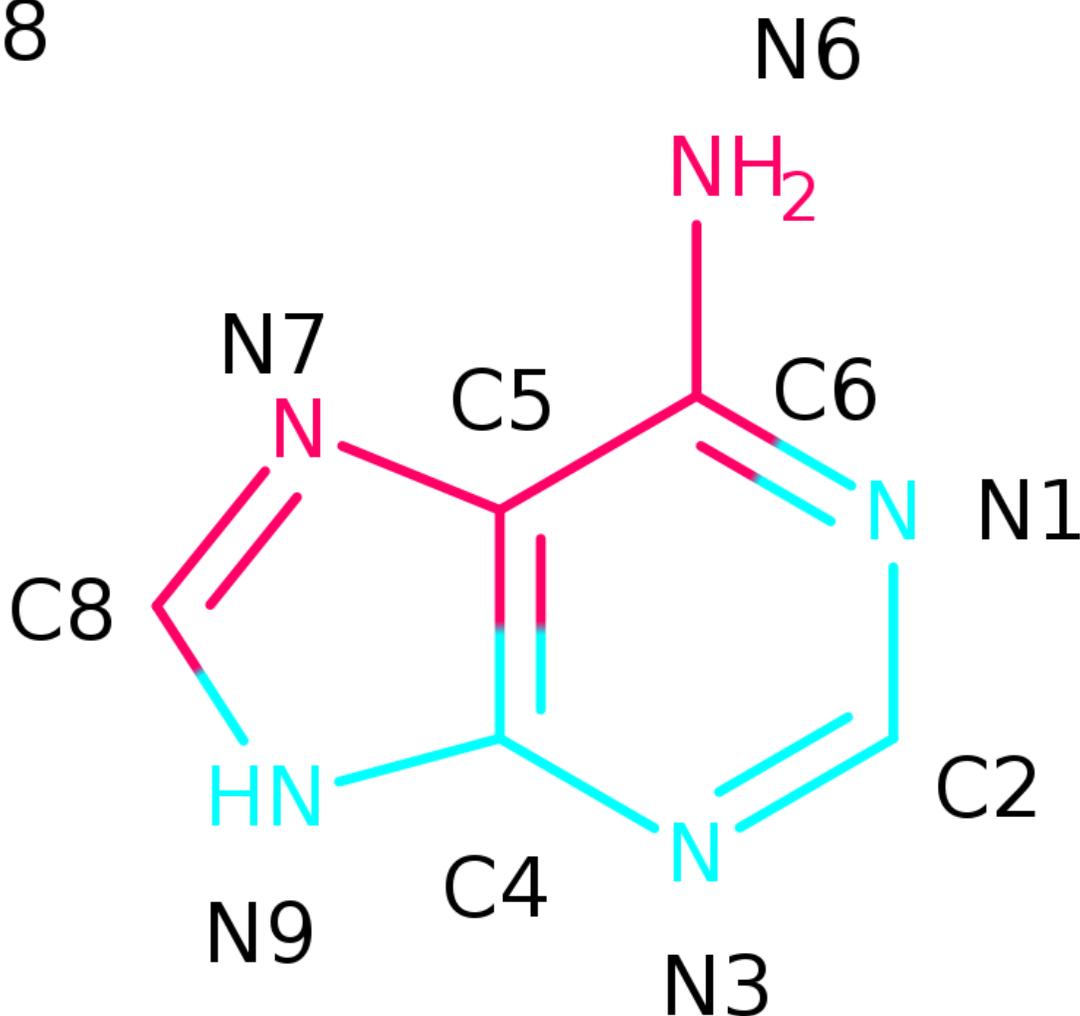
Term3, pr2

Задание 2

Начнём работу с исследования нуклеотида в составе А-формы сгенерированной `fiber` ДНК:

Here is

A8



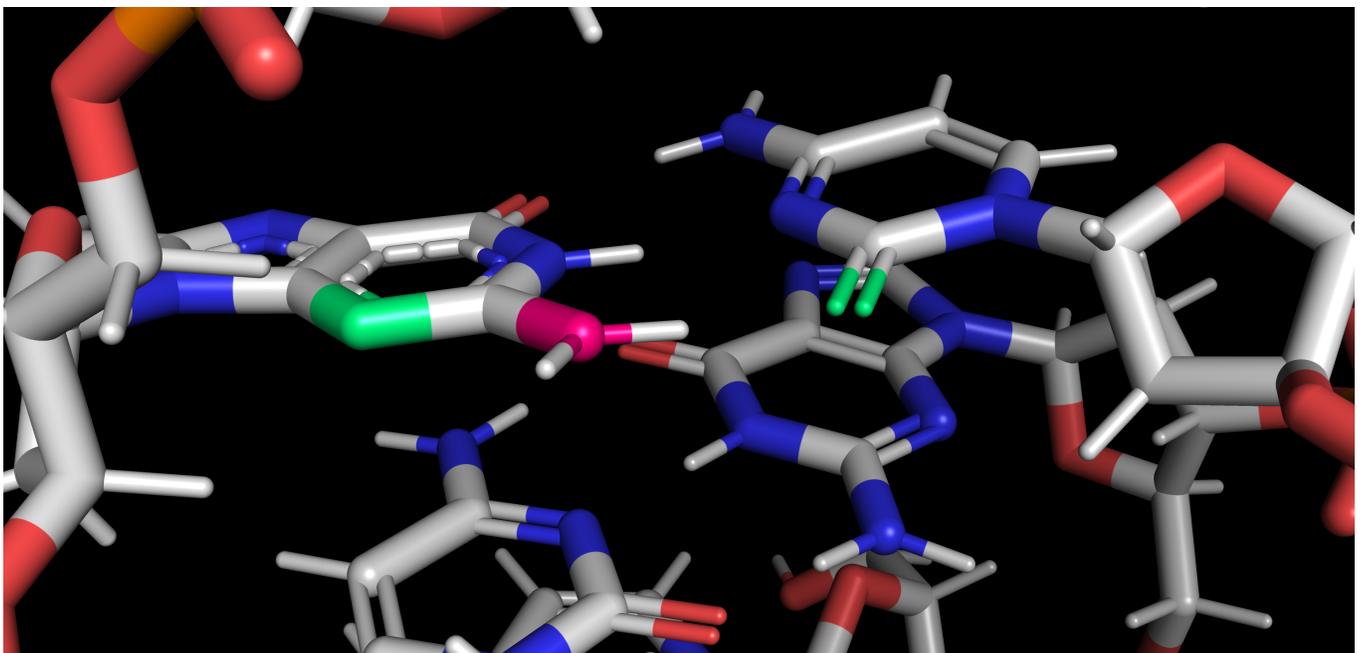
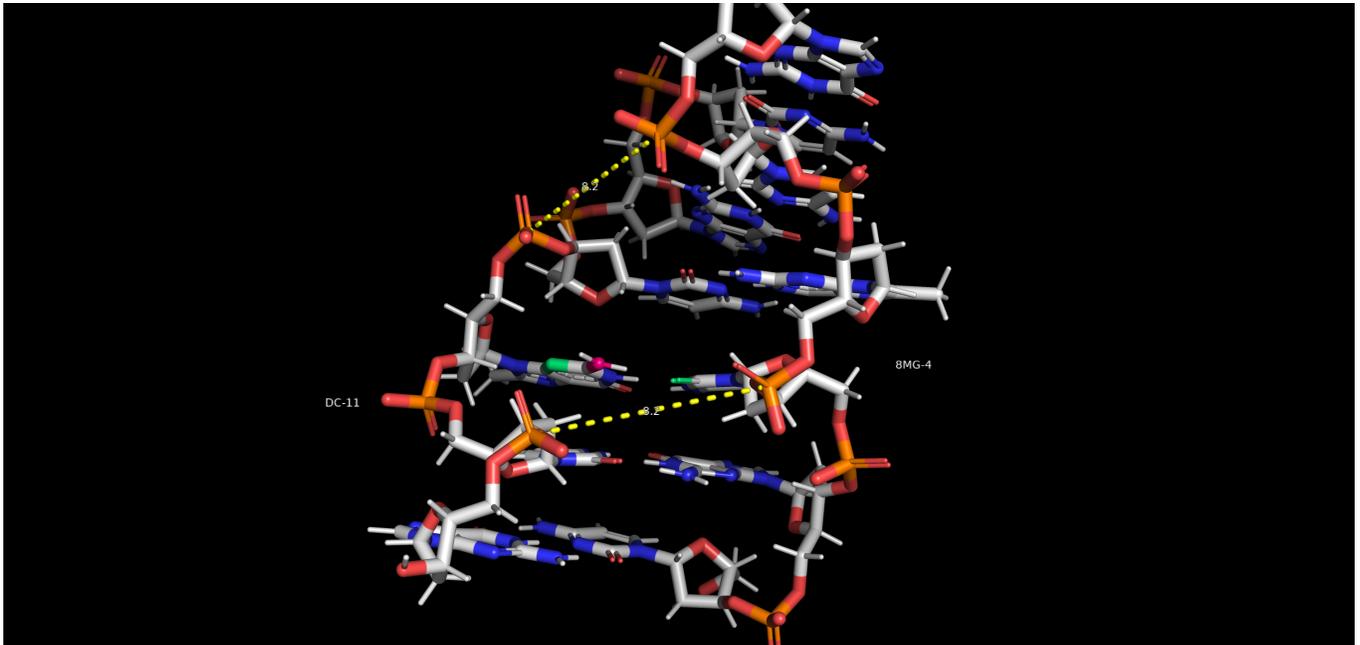
Для исследуемого нуклеотида мы можем установить:

- в сторону большой бороздки устремлены атомы, отмеченные красным цветом: A8N7, A8C5, A8C6, A8N6, A8N7
- к малой бороздке направлены A8C2, A8N3, A8C4, A8N9

Прежде чем двинуться дальше, заметим: вообще говоря, большая и малая бороздки определяются тем, какие атомы в них "смотрят": в малой всегда находится паттерн "акцептор-донор-акцептор" в смысле акцепторов и доноров водородной связи - здесь донором считается тот, у кого водород. В большой же бороздке такого регулярного паттерна нет, и обращены к ней не 3, а 4 атома, разнообразие расположения которых даёт ДНК-

связывающим белкам возможность специфично распознавать конкретные сайты.

Примечание: у Z-формы ДНК только одна вогнутая траектория - малая бороздка, большая является выпуклой. Это видно из описанного выше паттерна: он наблюдается в единственном углублении этой форм двойной спирали:

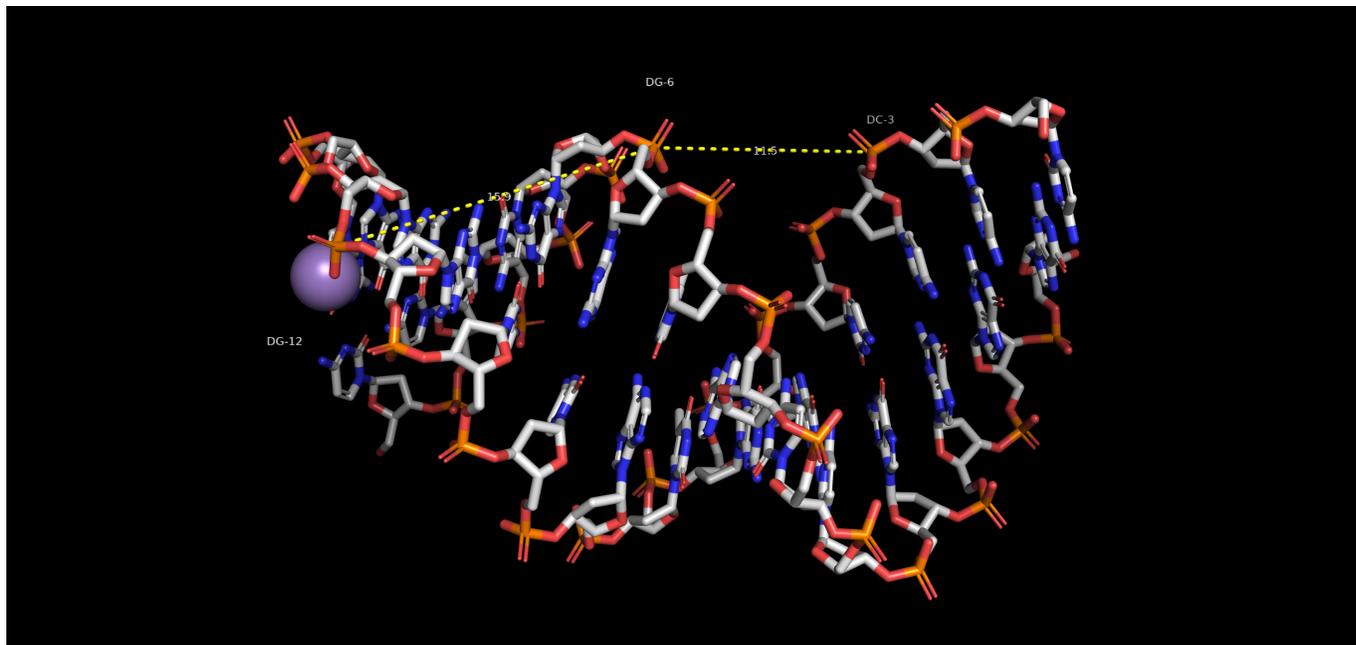


Теперь можем перейти к таблице. Для ясности приведём картинку с измерениями ширин бороздок - на них же будут указаны номера атомов, между которыми проводились измерения.

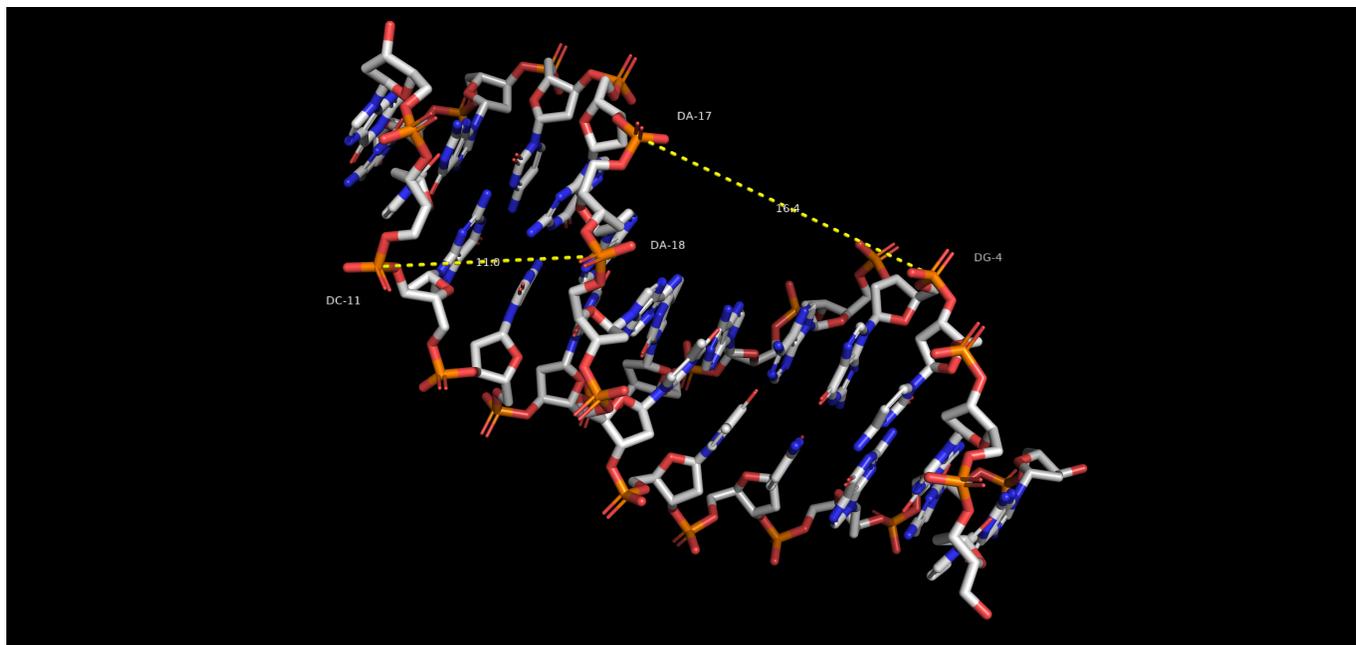
	А-форма	В-форма	Z-форма
Тип1 спирали (правая или левая)	правая	правая	левая
Шаг спирали (Å)	27.7	30.1	53.2
Число оснований на виток	12	10	15

	А-форма	В-форма	Z-форма
Ширина большой бороздки	11.5	16.4	None
Ширина малой бороздки	15.9	11.0	8.2

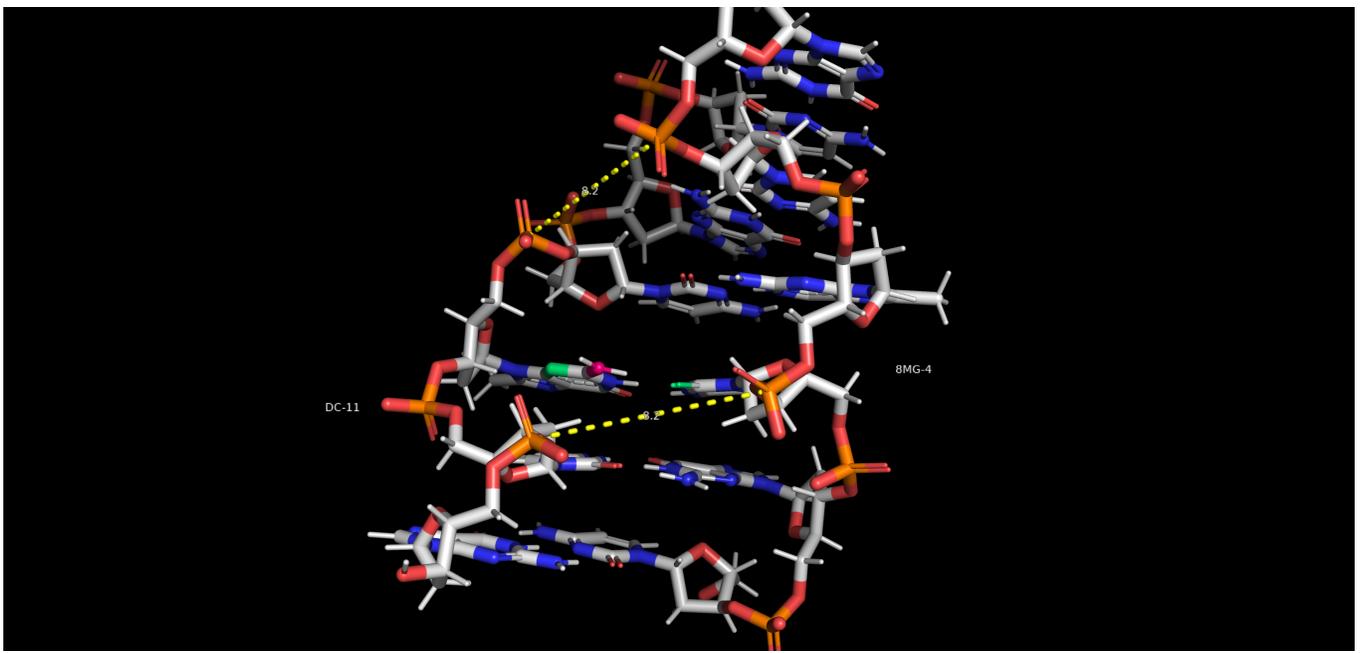
А-форма:



В-форма:



Z-форма:



Задание 3

Упр. 1

Запустим конвейер:

```
remediator --old 2CV0.pdb | find_pair -t | analyse
```

Один из выходных файлов - `2CV0.pdb`. Откроем его:

в разделе **main chain and chi torsion angles** находим значения семи торсионных углов для каждого нуклеотида:

Main chain and chi torsion angles:

Note: alpha: O3'(i-1)-P-05'-C5'
 beta: P-05'-C5'-C4'
 gamma: O5'-C5'-C4'-C3'
 delta: C5'-C4'-C3'-O3'
 epsilon: C4'-C3'-O3'-P(i+1)
 zeta: C3'-O3'-P(i+1)-O5'(i+1)

chi for pyrimidines(Y): O4'-C1'-N1-C2
 chi for purines(R): O4'-C1'-N9-C4

Strand I

base	alpha	beta	gamma	delta	epsilon	zeta	chi
1 G	---	168.7	43.2	92.0	-145.9	-81.2	-172.5
2 G	-76.0	-178.5	53.6	84.9	-144.7	-70.2	-161.4
3 C	-63.1	171.3	49.2	83.6	-152.0	-71.1	-159.4
4 C	-65.7	171.7	54.7	80.1	-155.2	-77.1	-166.0
5 C	-57.3	171.9	50.1	81.8	-156.3	-67.8	-155.4
6 C	-67.0	174.4	61.6	86.5	-159.4	-72.0	-166.2
7 A	-53.4	-167.3	46.9	116.0	23.3	162.8	-118.4
8 G	55.0	144.5	40.9	83.8	-149.2	-70.5	-179.1
9 G	-60.4	-174.5	44.8	80.6	-158.1	-68.8	-160.4
10 G	-61.9	177.2	46.9	81.4	-166.4	-85.9	-162.1
11 G	164.7	-152.3	161.8	84.0	-107.3	-85.3	179.7
12 G	-71.2	134.7	85.0	79.1	-131.9	-84.8	168.5
13 U	-46.9	166.6	38.9	80.5	-118.3	-76.0	-168.2
14 U	-54.4	157.4	53.3	79.2	-142.0	-66.0	-150.9
15 A	-58.0	171.6	44.7	85.8	-147.2	-57.9	-166.0
16 G	-71.8	176.9	54.7	82.0	-153.4	-73.5	-165.4

B Classification of each dinucleotide step ... можем отыскать, на какую форму ДНК похож каждый динуклеотидный шаг по молекуле. В нашем случае, это А-форма:

Classification of each dinucleotide step in a right-handed nucleic acid structure: A-like; B-like; TA-like, or other cases.

step	Xp	Yp	Zp	XpH	YpH	ZpH	Form
1 GG/UC	-1.34	8.10	2.44	-4.25	7.64	3.65	A
2 GC/GU	-1.20	8.30	2.86	-3.14	7.91	3.81	A
3 CC/GG	-1.28	8.15	2.93	-4.80	7.95	3.45	A
4 CC/GG	-1.15	8.15	2.80	-4.79	7.85	3.55	A
5 CC/GG	-1.36	8.21	2.73	-5.84	7.17	4.84	A
6 CA/UG	-1.57	8.42	2.46	-4.92	6.92	5.33	A
7 AG/CU	-2.55	7.77	2.56	-3.43	7.92	2.22	A
8 GG/CC	-1.58	8.16	2.70	-5.08	7.95	3.26	A
9 GG/CC	-1.21	8.29	2.61	-4.27	8.00	3.39	A
10 GG/CC	-1.61	8.24	2.50	-6.60	7.05	4.89	A
11 GG/CC	-1.82	7.88	3.18	-5.58	7.56	3.79	A
12 GU/AC	-1.04	6.43	4.58	-2.46	6.41	4.62	
13 UU/GA	3.75	4.40	0.55	1.75	4.44	0.82	
14 UA/CG	---	---	---	---	---	---	---

Упр. 2

Файл, где можно найти координаты стеблей, получаем командой

```
find_pair -t 2CV0_old.pdb > pairs.out.
```

Стебли:

Стебель	Координаты
Акцепторный стебель	1-7
D-стебель	10-15
T-стебель	49-53
Антикодонный стебель	22-32
Общее число канонических пар нуклеотидов	19

Нестеблевые пары, стабилизирующие третичную структуру:

54 55 10 14 15 19

58 18 25 8 48 56

9 неканонических взаимодействий:

2 G-*---U 71

54 U-**--A 58

55 U-**+-G 18

38 A-**--C 32

44 A-**--G 26

13 U-*---G 22

14 A-**--U 8

15 G-**+-C 48

Упр. 3

Нарисуем динуклеотидную пару с наибольшим перекрытием:

#2, GC/GU, 13.66 Å²

