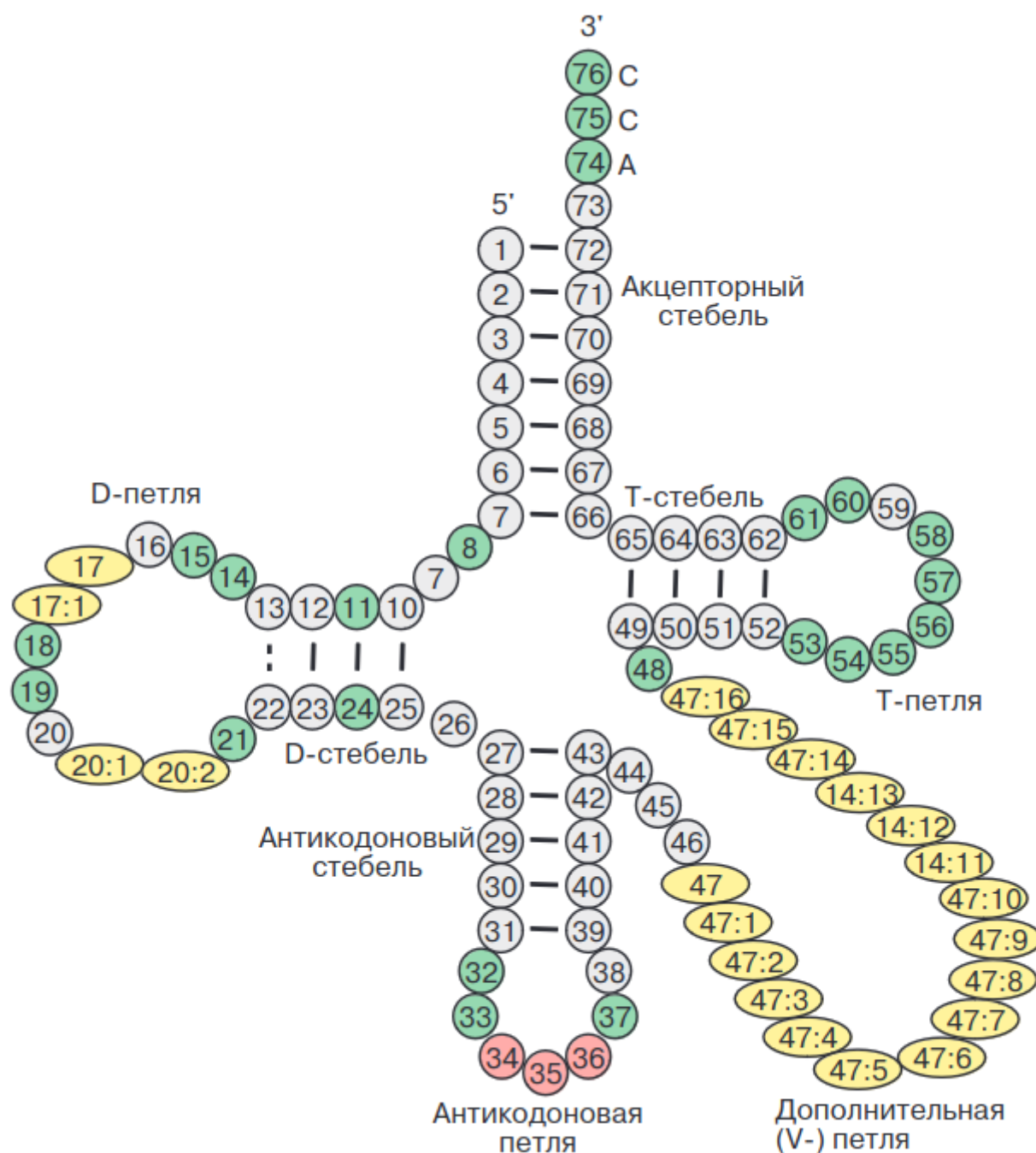


Term3, pr3

Задание 1

Расшифровку названий петель можно найти в [статье](#):



Участок структуры	Позиции в структуре (по результатам find_pair)	Результаты предсказания с помощью einverted	Результаты предсказания по алгоритму Зукера
Т-стебель	49-53	55-69	48-52
Общее число канонических пар нуклеотидов	19	27	22*

* [алгоритм Зукера](#) не адаптирован для работы с неканоническими взаимодействиями, поэтому все пары, что он нашёл - Уотсон-Криковские.

```
select contacts, polymer.nucleic within 4.0 of polymer.protein
show spheres, contacts
set sphere_scale, 0.25, contacts
```

Задание 2

Упр. 2

Назовём *полярными* атомы азота и кислорода, *неполярными* - углерода, фосфора и серы.

Назовем *полярным контактом* ситуацию, в которой расстояние между полярным атомом белка и полярным атомом ДНК меньше 3.5 Å. Аналогично, *неполярным контактом* будем считать пару неполярных атомов на расстоянии меньше 4.5Å.

Сделаем себе шпаргалку обозначений атомов из `.cif`-файлов, которые могут нам пригодиться:

Атом	Обозначение
Кислород при фосфате	OP1
Кислород при фосфате	OP2
Фосфор фосфата	P
<i>i</i> -й углерод сахара	*C <i>i</i> '
<i>i</i> -й кислород сахара	*O <i>i</i> '
<i>i</i> -й углерод основания	C <i>i</i>

Атом	Обозначение
i -й кислород основания	O_i
i -й азот основания	N_i

Теперь создадим основных 2 selection'a - они будут соответствовать контактам на ДНК с порогом на расстояние 3.5 и 4.5 Å - заготовка для полярных и неполярных контактов соответственно:

```
select polar, polymer.nucleic within 3.5 of polymer.protein
```

```
select nonpolar, polymer.nucleic within 4.5 of polymer.protein
```

У дезоксирибозы и фосфата полярные контакты способны образовывать кислороды, у азотистого основания ещё и азоты. Применим мощь *selection algebra*'ы!

- полярные контакты фосфатов

```
select phosphorpolar, polar and (name op1 or name op2)
```

- неполярные контакты фосфатов

```
select phosnonp, nonpolar and name P
```

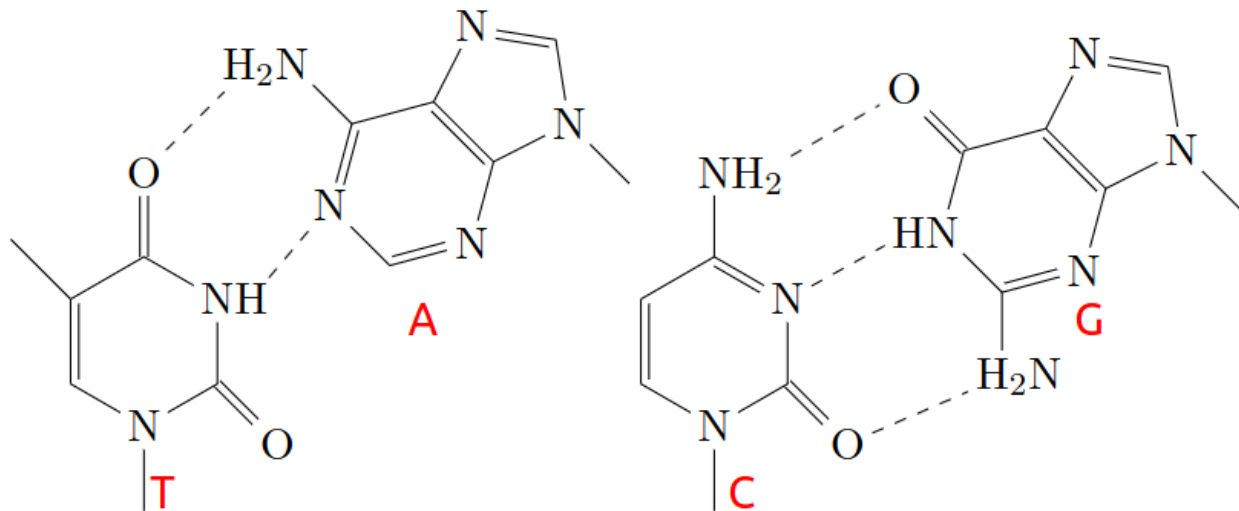
- полярные контакты дезоксирибоз

```
select ribosepolar, polar and (name *O3' or name *O4' or name *O5')
```

- неполярные контакты дезоксирибоз

```
select ribononp, nonpolar and (name *C1' or name *C2' or name *C3' or name *C4' or name *C5')
```

Выбор большой и малой бороздок требует отдельного комментария. Будем считать, что в малую бороздку экспонированы всегда 3 атома от пары азотистых оснований, составляющие паттерн "нуклеофил-smth-нуклеофил", в большую же бороздку выставляются 4 атома от пары.



Определим, какие же атомы от каких оснований мы относим к какой из бороздок явно (неканоническими взаимодействиями пренебрегаем):

Основание	Малая бороздка	Большая бороздка
T	O2	C5, O4
C	O2	C5, N4
A	N2, C3	N7, C5, N6
G	N3, N2	N7, C5, O6

Цветом выделены атомы, в нашей парадигме неполярные.

Наконец, можем их посчитать:

- polar, minor groove

```
select polming, polar and ((resn DT and name O2) or
(resn DC and name O2) or (resn DA and name N2) or (resn
DG and (name N3 or name N2)))
```

- polar, major groove

```
select polmajg, polar and ((resn DT and name O4) or  
(resn DC and name N4) or (resn DA and (name N7 or name  
N6)) or (resn DG and (name N7 or name O6)))
```

- nonpolar, minor groove

```
select nonpming, nonpolar and (resn DA and name C3)
```

- nonpolar, major groove

```
select nonpmajg, nonpolar and ((resn DT and name C5) or  
(resn DC and name C5) or (resn A and name C5) or (resn  
DG and name C5))
```

Контакты атомов белка с	Полярные	Неполярные	Всего
остатками 2'-дезоксирибозы	9	56	65
остатками фосфорной кислоты	25	20	45
остатками азотистых оснований со стороны малой бороздки	2	0	2
остатками азотистых оснований со стороны большой бороздки	16	8	24

Обсуждение. Наблюдаемая картина довольно хорошо согласуется с нашими представлениями об устройстве ДНК-белковых контактов. Все взаимодействия либо можно разделить на две категории - те, что обуславливают стабильность комплекса в целом, и те, которые обеспечивают специфичность взаимодействия.

"Неспецифические" контакты должны ориентироваться на те части ДНК, которые неизменны в зависимости от её последовательности - **сахарофосфатный остов и малая бороздка** (выше мы уже обсудили, что там всегда один и тот же паттерн). Кроме того, для всех этих частей ДНК характерно

наличие заряда или полярность, откуда выходит, что полярных контактов должно быть больше, что и наблюдается на практике.

Специфические для последовательности контакты часто работают через **большую бороздку**, поскольку наборы атомов, которые в неё экспонируются, зависят от того, какая это пара. Кроме того, взаимодействие вновь предполагается вместе с полярными атомами оснований, поэтому логично, что в большой бороздке мы насчитали больше полярных взаимодействий, чем неполярных.

Упр. 3

Обсудим результат запуска программы `nucplot`. Наибольшее количество контактов с ДНК имеют Asp84 обоих мономеров белка (напомню, что мы в этом практикуме исследуем гомодимер). Обе аминокислоты связывают фосфат ДНК и дополнительно координируются ионом Ca^{2+} . Понятно, что эти контакты просто поддерживают стабильность связи между субъединицами белка и дуплексом ДНК.

Среди аминокислот, имеющих контакт с азотистыми основаниями, больше всего контактов у Asp140 (опять же, на обоих цепях). Исходя из предположения, что он связывает подряд идущие С и Т, мы делаем предположение, что белок специфично связывает сайты, в которых присутствуют подряд идущие СТ-пары, и Asp140 обоих субъединиц вносит в эту избирательность значительный вклад.

