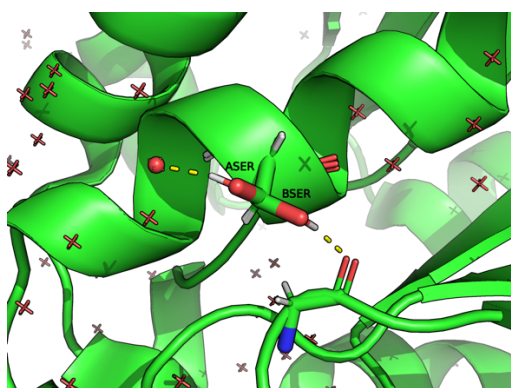


# Практикум 3. Альтернативные положения, В-фактор, кристалл

## Задание 1. Альтернативные положения

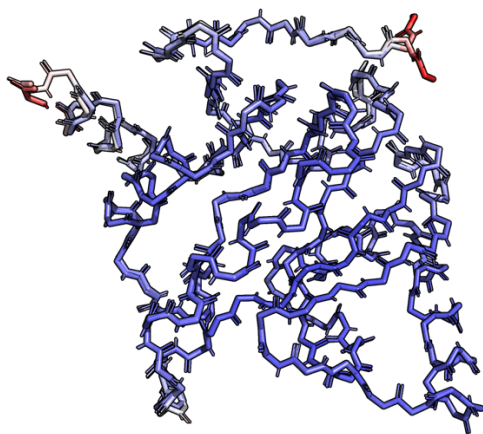
Мне предлагалось рассмотреть альтернативные положения 111 остатка серина в А цепи макродомена NSP3 SARS-CoV-2 с PDB ID 7KR0. Всего для этого остатка существуют два альтернативных положения. В положении "А" гидроксильная группа серина направлена на атом кислорода молекулы воды, образуя с ней водородную связь, населенность этого положения 0.6. Во втором положении гидроксильная группа серина образует водородную связь с остатком глицина в неструктурированном участке белка, населенность этого положения 0.4. Предпочтительность первого предположения в кристаллической структуре определяется тем, что молекула воды, с которой серин взаимодействует в этом положении, находится в одном положении, а неупорядоченный фрагмент белка имеет несколько конформаций, в некоторых из которых образование водородной связи невозможно.



**Рисунок 1.** Альтернативные положения A/SER`111 в структуре NSP3.

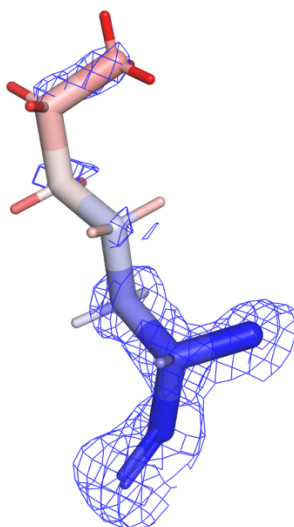
## Задание 2. В-фактор

В этом задании я изобразил остов белка, покрашенный в соответствии со значением В-фактора (Рисунок 2). В-фактор связан с неопределенностью структуры и отражает подвижность атома. В данном случае мы видим, что наиболее подвижными являются терминальные фрагменты белка. Более всего упорядочены фрагменты, находящиеся внутри глобулы.



**Рисунок 2.** Остов белка NSP3, покрашенный в соответствии с B-фактором.

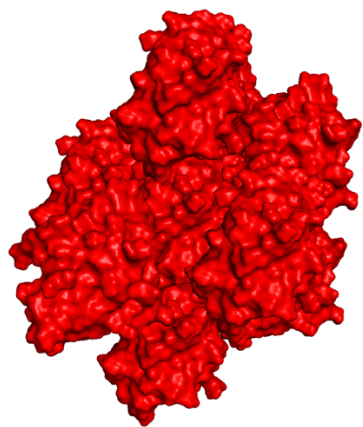
Затем я рассмотрел зависимость значения B-фактора от положения атома в боковом радикале аминокислоты. Для этого я рассмотрел остаток A/LYS`29. Видно, что чем ближе атом к альфа положению, тем ниже его B-фактор (Рисунок 3). Это отражается на электронной плотности, чем выше значение B-фактора, тем меньше отображение его электронной плотности. Это происходит, потому что вероятность нахождения электрона в какой-то точке становится меньше при уменьшении вероятности нахождения атома в конкретной точке.



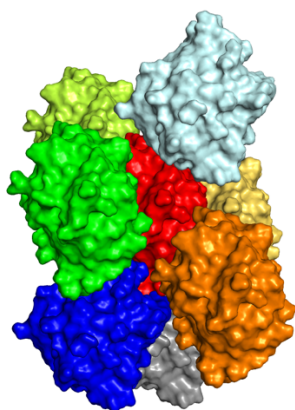
**Рисунок 3.** Остаток A/LYS`29 в структуре NSP3. Атомы покрашены в соответствии с B-фактором (синим цветом обозначены низкие значения B фактора).

### Задание 3. Соседи

В этом задании мы показали всех соседей исходной молекулы белка в кристалле на уровне отсечки 5 (Рисунок 4) и все молекулы, непосредственно взаимодействующие с исходной (Рисунок 5). Получается, белок взаимодействует с 7 другими молекулами.



**Рисунок 4.** Структура кристалла NSP3 на уровне отсечки 5.



**Рисунок 5.** Структура кристалла NSP3, показаны только белки взаимодействующие непосредственно с исходной молекулой белка