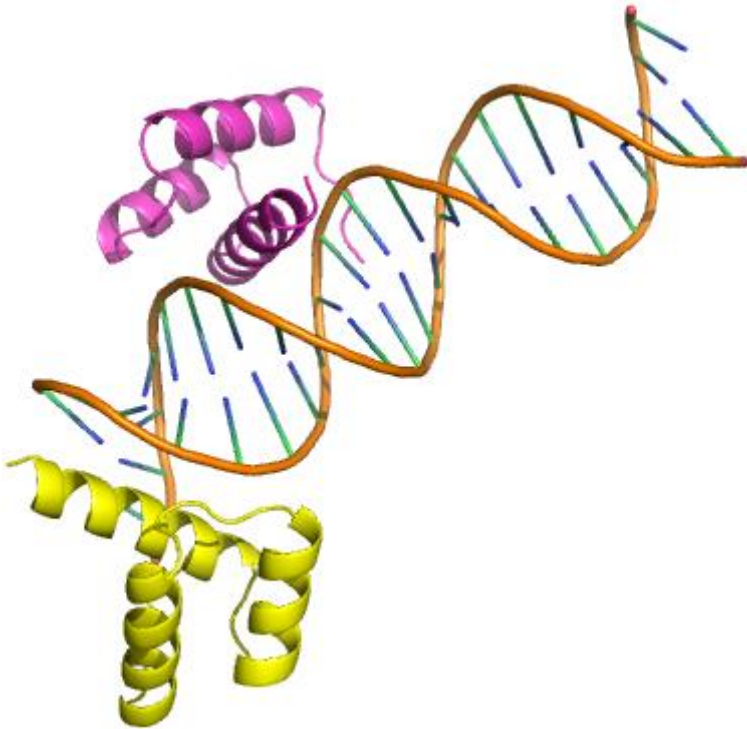


# Восстановление окружения молекулы белка в кристалле

## 1. Объяснение расположения белковых цепей в структуре комплекса ЗНДД

В модели комплекса ЗНДД имеется двойная спираль ДНК и две белковые цепи, которые, однако, располагаются ассиметрично: одна из цепей (цепь А) взаимодействует со средней частью спирали, другая (цепь В) - с одним из её концов.

Комплекс, находящийся в одной элементарной ячейке



Для объяснения ассиметричного расположения двух белковых цепей были также показаны элементарные ячейки, соседствующие с цепью В. Для этого использована команда «*symexp sym, ZHDD, chain b, 5*». При совместном отображении исходной элементарной ячейки и одной из соседних с ней можно видеть, что на самом деле разные цепи белка связываются одинаково (в большой бороздке спирали ДНК), просто в модели указана лишь часть всей цепи ДНК.

Комплекс, находящийся в двух соседних элементарных ячейках



Кроме того, в структуре 3HDD обнаружена вращательная симметрия: молекулы белка, находящиеся в разных ячейках, связывают более одной цепи ДНК, а также связываются между собой. Однако разные цепи ДНК повернуты друг относительно друга на некоторый угол (см. рис.).

Комплекс, находящийся в четырёх соседних элементарных ячейках



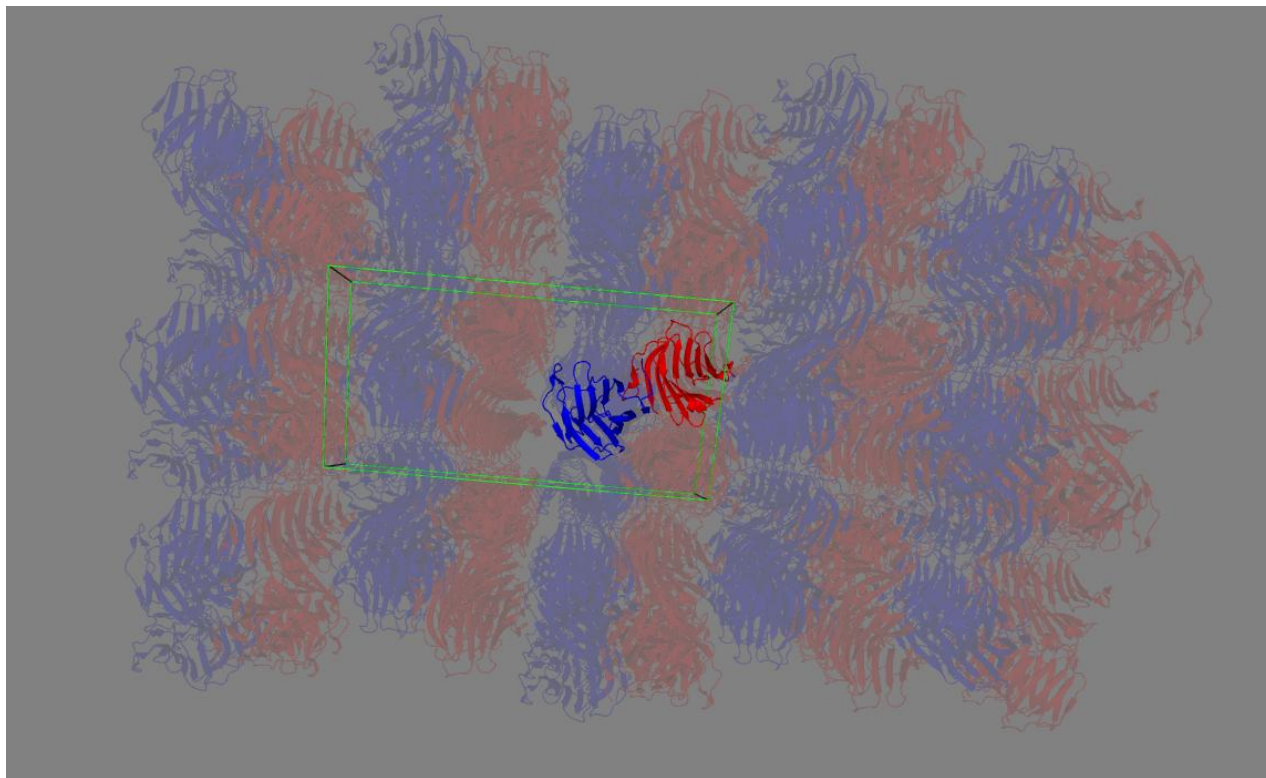
Для исследования водородных связей в участке контакта цепи В белка с ДНК из соседней ячейки (предполагаемая область контакта обведена на рисунке выше) были задано множество атомов: *dna\_polar* (содержит близко расположенные к молекуле белка атомы ДНК в ячейке, симметричной исходной (цепь С, остатки 201-104 и цепь D, остатки 340-342));





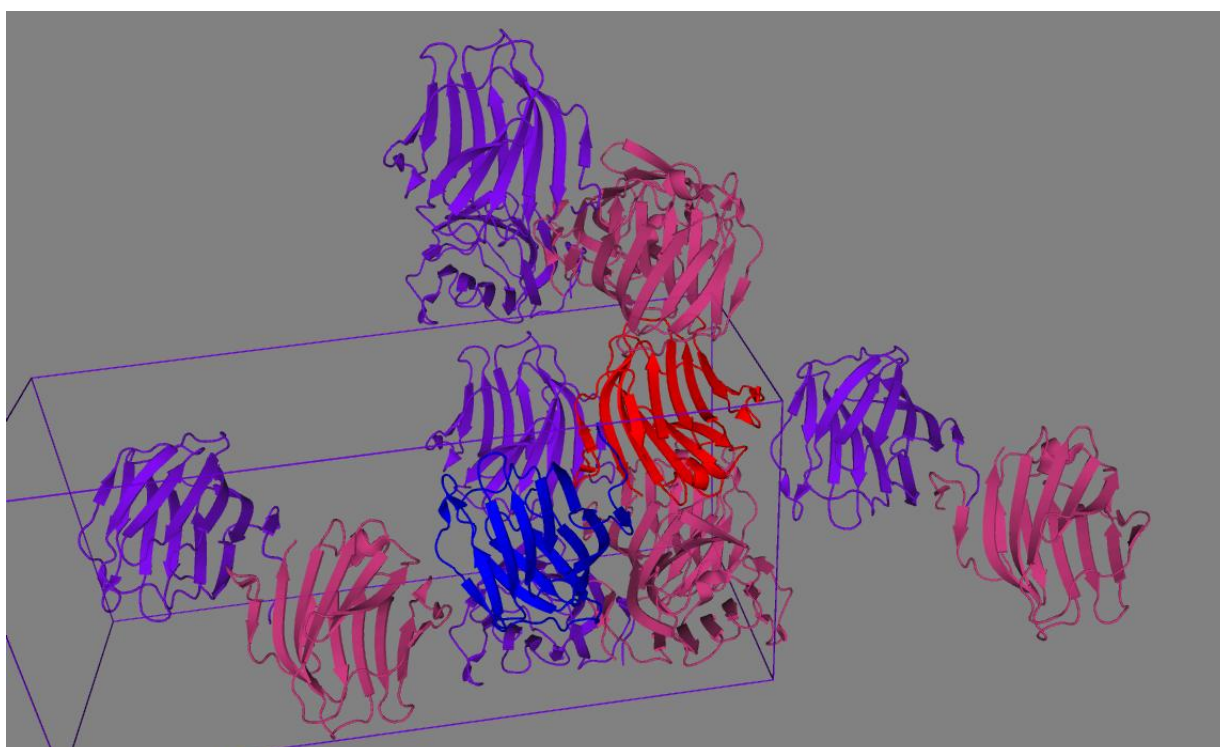
## 2. Контакты молекул из записи PDB 3MW9, поддерживающие структуру кристалла

Для отображения ячеек кристалла применим команду: «*symexp sym, 3vv1, all, 50*».

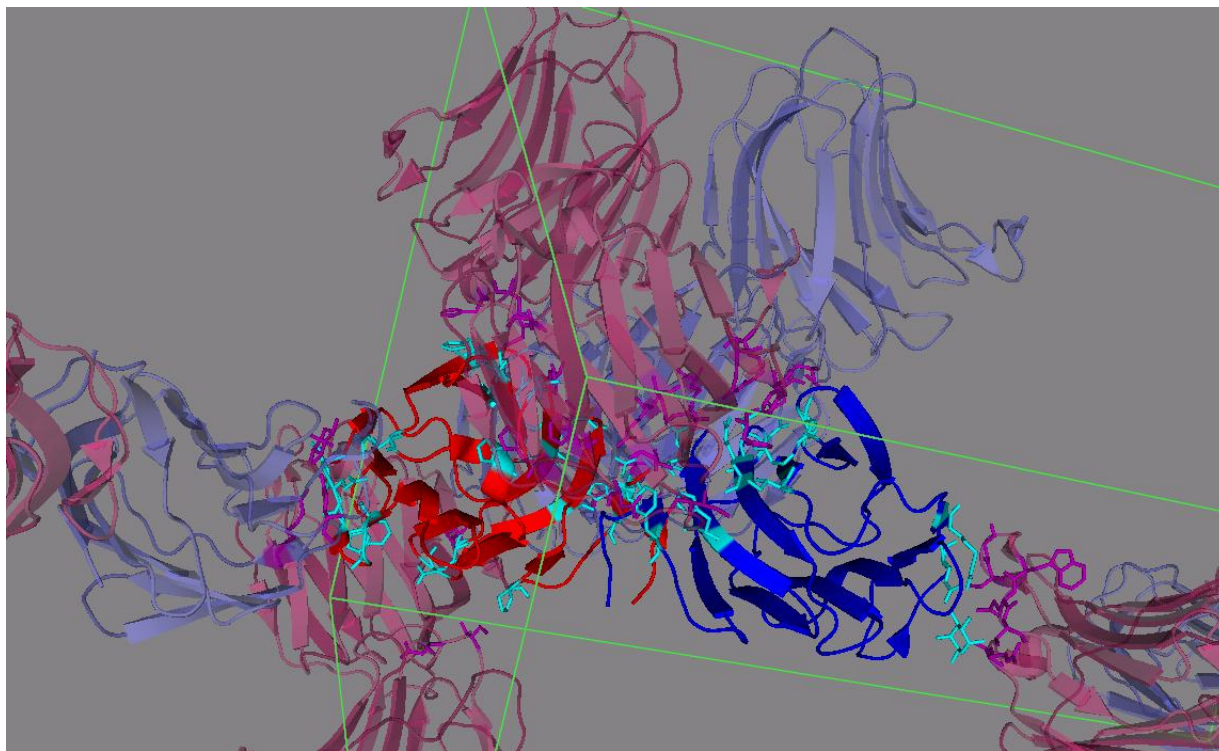


Элементарная ячейка записи 3VV1 (белок в ячейке выделен) в кристалле.

При этом две из соседних с элементарной ячеек образуют с исходным белком один слой кристалла. Остальные белки контактируют с искомым в областях выше- и ниже расположенных относительно исходной ячейки слоях кристалла.



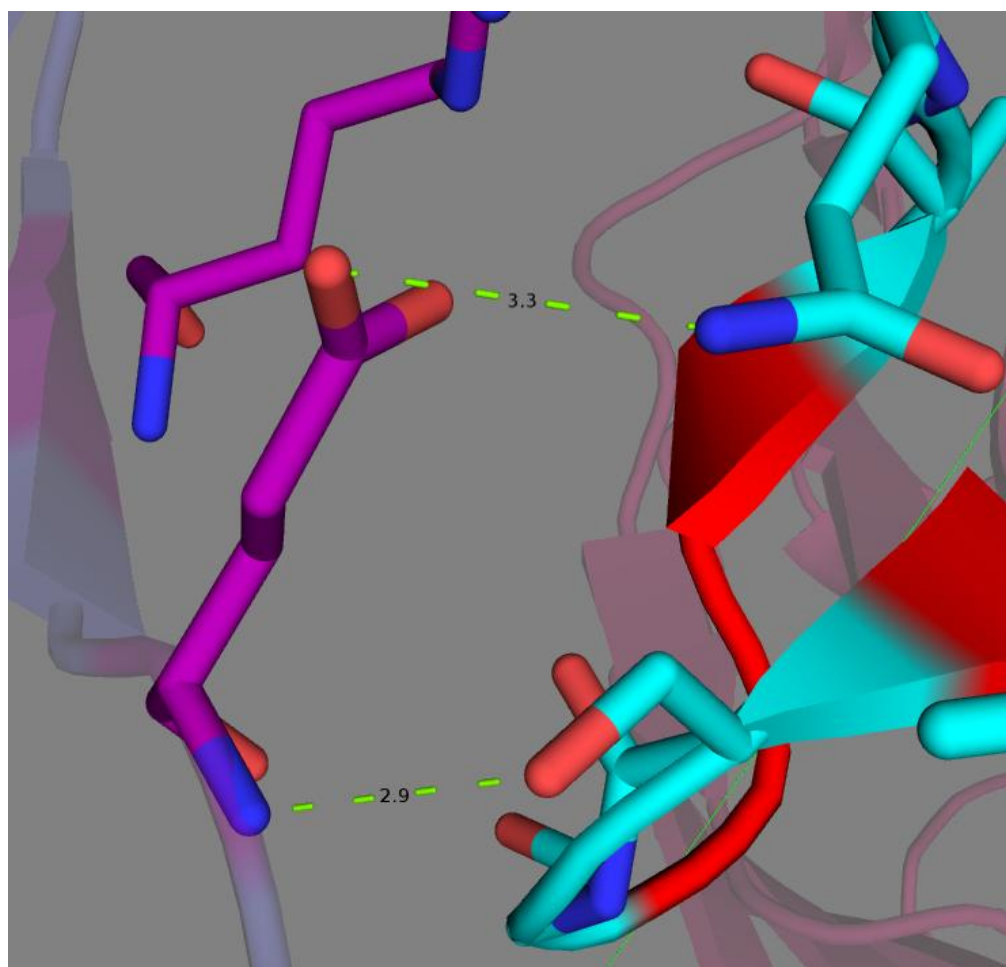
Элементарная ячейка записи 3VV1 (белок в ячейке выделен) и соседние с ней



Два типа контактов в структуре кристалла 3MW9 (часть ячеек убрана)

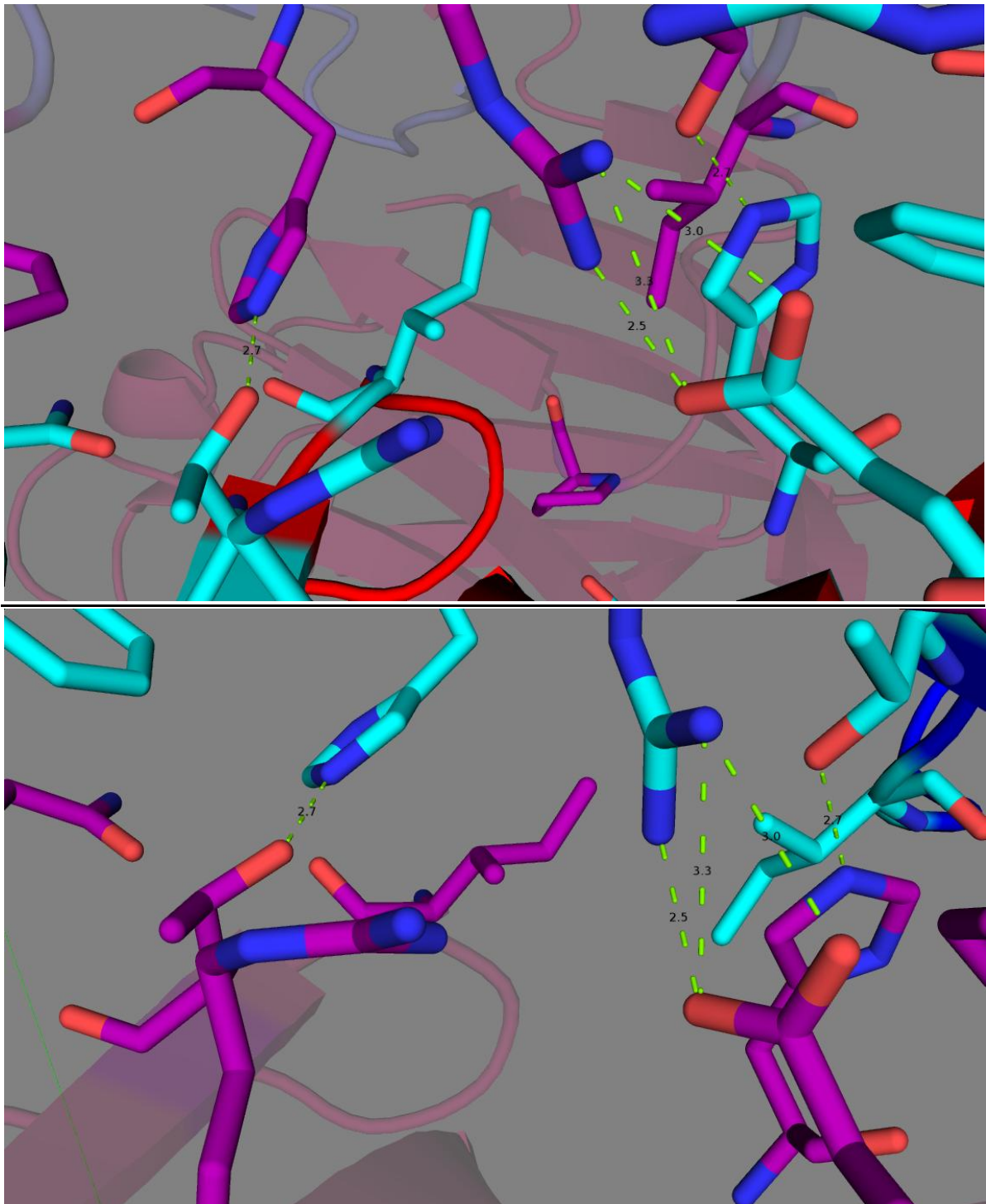
Взаимодействия между молекулами белка в области «антенн» (остатки цианового цвета – белка элементарной ячейки, фиолетового – соседних белков):

- 1) Электростатическое притяжение (сверху) и водородная связь (снизу)





- 2) Ещё пример связей (между белками в одном слое; регулярность расположения связей еще раз подтверждает)



Вывод: молекулы белка прочно удерживаются в кристалле за счёт взаимодействий друг с другом. К этим взаимодействиям относятся электростатическое притяжение, водородные связи, а также другие типы (не показаны на рисунках) вроде стэкинг- взаимодействий, ван-дер-ваальсовых взаимодействий и других.