

Демонстрация умений

Задание d1: определение вторичной структуры модели 1R5T

Алгоритмы DSSP и Stride

Для определения вторичной структуры модели 1R5T были использованы веб-сервер алгоритма [DSSP](#) и алгоритма [Stride](#). В результате были получены текстовые файлы, в котором для каждого остатка указано, к какому типу вторичной структуры он относится.

И DSSP, и Stride точно предсказывают β -структуры вторичной укладки: тяжи β -листа и β -мостики. Хуже дела обстоят с предсказыванием спиральных структур: оба алгоритма недопредсказывают по одному остатку с обоих концов, изредка только с одного. Хотя, это может быть и субъективной ошибкой расшифровки файла выдачи.

Результат DSSP (номера остатков)	Результат Stride (номера остатков)	Аннотация в файле (номера остатков)
α -спирали		
8-21	8-21	7-22
62-72	62-73	61-73
97-104	97-105	96-105
128-131	128-131	128-132
β -тяжи		
34-39	34-39	34-39
45-49	45-49	45-49
81-86	81-86	81-86
112-116	112-116	112-116
123-127	123-127	123-127
3_{10} -спирали		
22-24	22-24	23-25
56-58	56-58	55-59
138-140	138-140	137-141
β -мостики		
26-51-60	26-51-60	-

Таблица 1. Сравнение результатов определения элементов вторичной структуры программами DSSP и Stride для цепи A модели структуры 1R5T

Алгоритм SheeP

В результате работы другого сервиса (<http://mouse.belozersky.msu.ru/sheep>) была получена карта ранее рассматриваемого β -листа, который в выдаче программы указан как «sht_1» (Рис.1). Выдача SheeP немного отличается от выдачи DSSP: все тяжи удлинены на 1-4 остатка, однако все «мостики» можно обнаружить и на Рис.3.

	Val144:A		Ile45:A	Phe46:A	Thr47:A	Gly48:A			
Asn41:A	Thr40:A		Leu39:A	Ile38:A	Ser37:A	Cys36:A	Gly35:A	Val34:A	Arg33:A
Gly78:A	Trp79:A	Lys80:A	Cys81:A	Met82:A	Val83:A	Ile84:A	Cys85:A	Gly86:A	Asp87:A
			Pro112:A	Ile113:A	Val114:A	Met115:A	Leu116:A	Asn117:A	
			Thr127:A	Met126:A	Val125:A	Lys124:A	Ser123:A	Arg122:A	

Рис.1. Карта β -листа (sht_1), полученная в результате работы сервиса Sheep.

Также, хочется отметить выдачу Sheep, соответствующую β -мостику в структуре. Вместо «тяжей» длиной один остаток, алгоритм определил целый отдельный β -лист:

Cys61:A	Ile60:A	Cys59:A	Asn58:A
Asn50:A	Val51:A	Glu52:A	Asn53:A
Ser25:A	Tyr26:A	Ser27:A	

Рис.2. Карта β -мостика, полученная Sheep.

Изображение обеих карт можно получить в JМol (Рис.3). Кроме того, можно увидеть соответствие между столбцами карты β -листа и хребтами в структуре («жёлтые» боковые группы направлены к поверхности белковой глобулы, «красные» – к её гидрофобному ядру).



Рис. 3. Изображение β -листа и β -мостика (толстые линии) в структуре 1R5T, цепь А. Красным и жёлтым выделены хребты, обращённые к гидрофобному ядру и к поверхности белковой глобулы соответственно.