

Демонстрация умений

Задание d2: совмещение структур

Совмещение структур своего белка и четырёх гомологов

Для поиска гомологов галектина LEC-6 (PDB-код: 3VV1) был использован сервис PDBeFold; поиск производился структуре цепи В.

Впоследствии в качестве гомологов были выбраны следующие структуры: 2NMO (цепь А), 2D6K (цепь А), 1BKZ(цепь В), 2YMZ (цепь D); все они являются галектинами разных организмов. Затем была выбрана функция “Submit for Multiple Alignment” → “view superposed”, откуда скачаны выровненные 3D-структуры (Рис.1А). Также со странички описания (“Submit for Multiple Alignment”) было скачано выравнивание в текстовом формате.

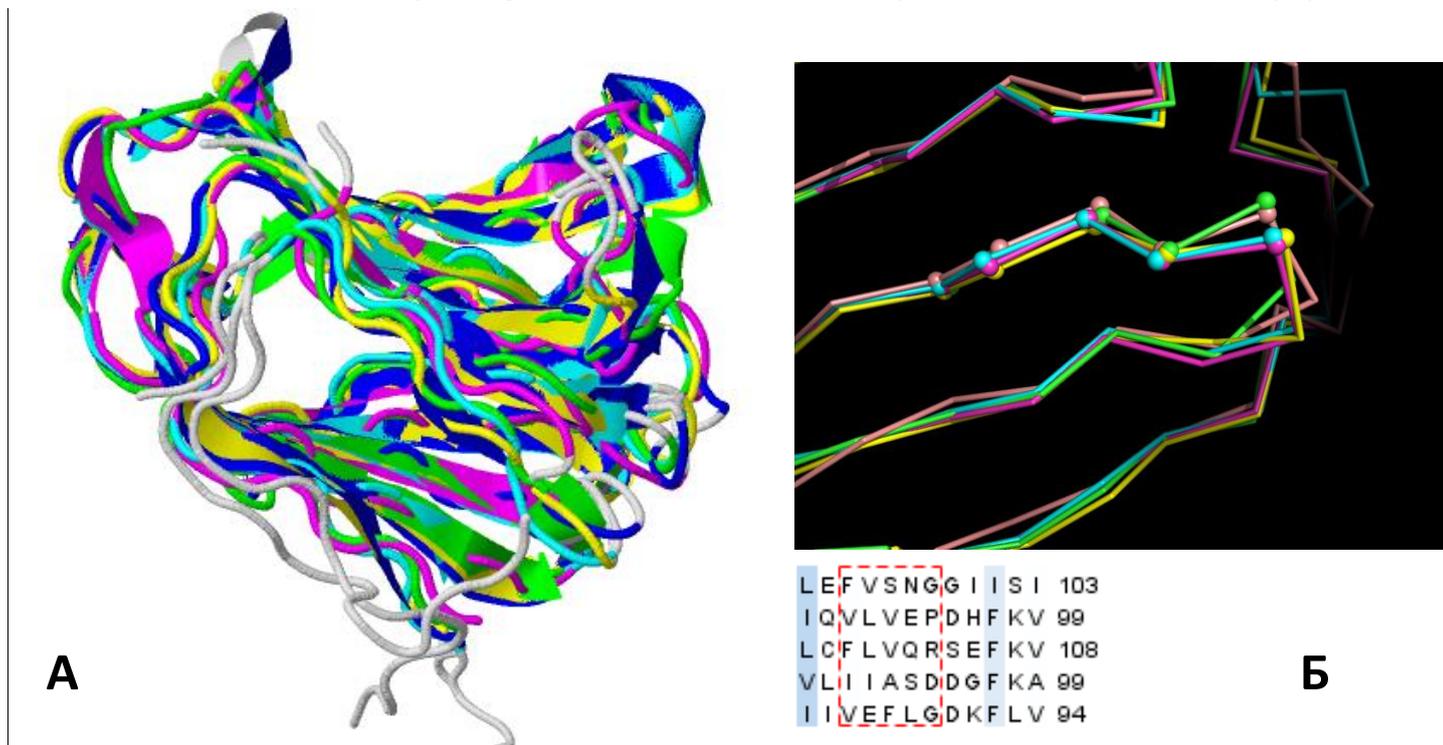


Рис.1. Суперпозиция структур глутаматдегидрогеназы из различных организмов. Разные структуры выделены разными цветами. (А) – вся цепь; (Б) – атомы СА невыравненных по последовательности остатков

В качестве примера разных остатков, выровненных в структуре можно привести конец одного из тяжёлых β -листа (Рис.1Б), в которой не имеются консервативные позиции (см. выравнивание в углу), однако структуры накладываются довольно неплохо. Да и в целом, имеется множество позиций, несовпадающих по типу остатков, но совпадающих по положению в структуре (Рис.2А).

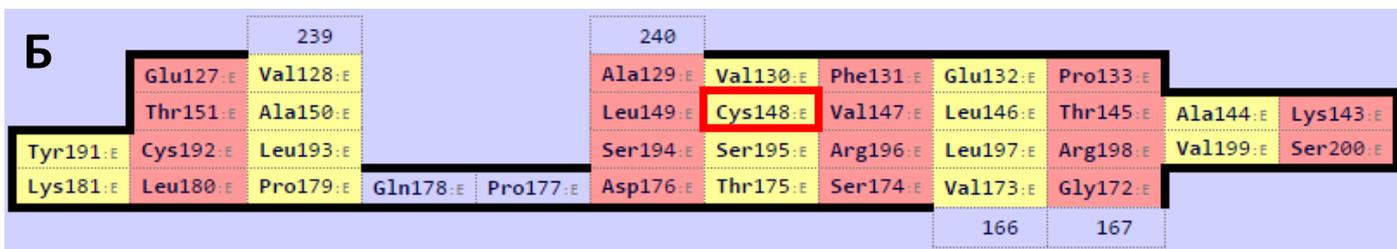


Рис.3. Карты β -листов (sht_2 (А) и sht_6 (Б)), полученные в результате работы сервиса SheeP. Выделен консервативный остаток Cys, образующий дисульфидную связь.

В дальнейшем вырежем из PDB-файла координаты атомов, соответствующие доменам SCOP: (118-206) для цепи α (D) и (119-247) для цепи β (E). При использовании команды «pair_fit /alpha//D/127+138-140+180+160/CA, /beta//E/130+147-149+195+175/CA» получим довольно неплохое выравнивание структур (Рис.4). Полученное выравнивание позволяет сделать вывод о сходстве топологий двух доменов, поскольку белковая цепь в обоих случаях имеет одинаковый ход (однако в случае цепи α образуется длинный нерегулярный участок между тяжами, а в случае цепи β – тяж другого β -листа).



Рис.4. Выравнивание структур константных доменов α (зеленые тяжи) и β (циановые тяжи) цепей Т-клеточного рецептора.