

Демонстрация умений

Задание d3: нахождение гидрофобных кластеров

С помощью сервиса Clud в структуре 3VV1 был произведён поиск гидрофобных кластеров. Со значениями 4.5 Å и 10 для порога расстояния и размера кластера, соответственно, было найдено 4 кластера, которые обозначены на изображении ниже:

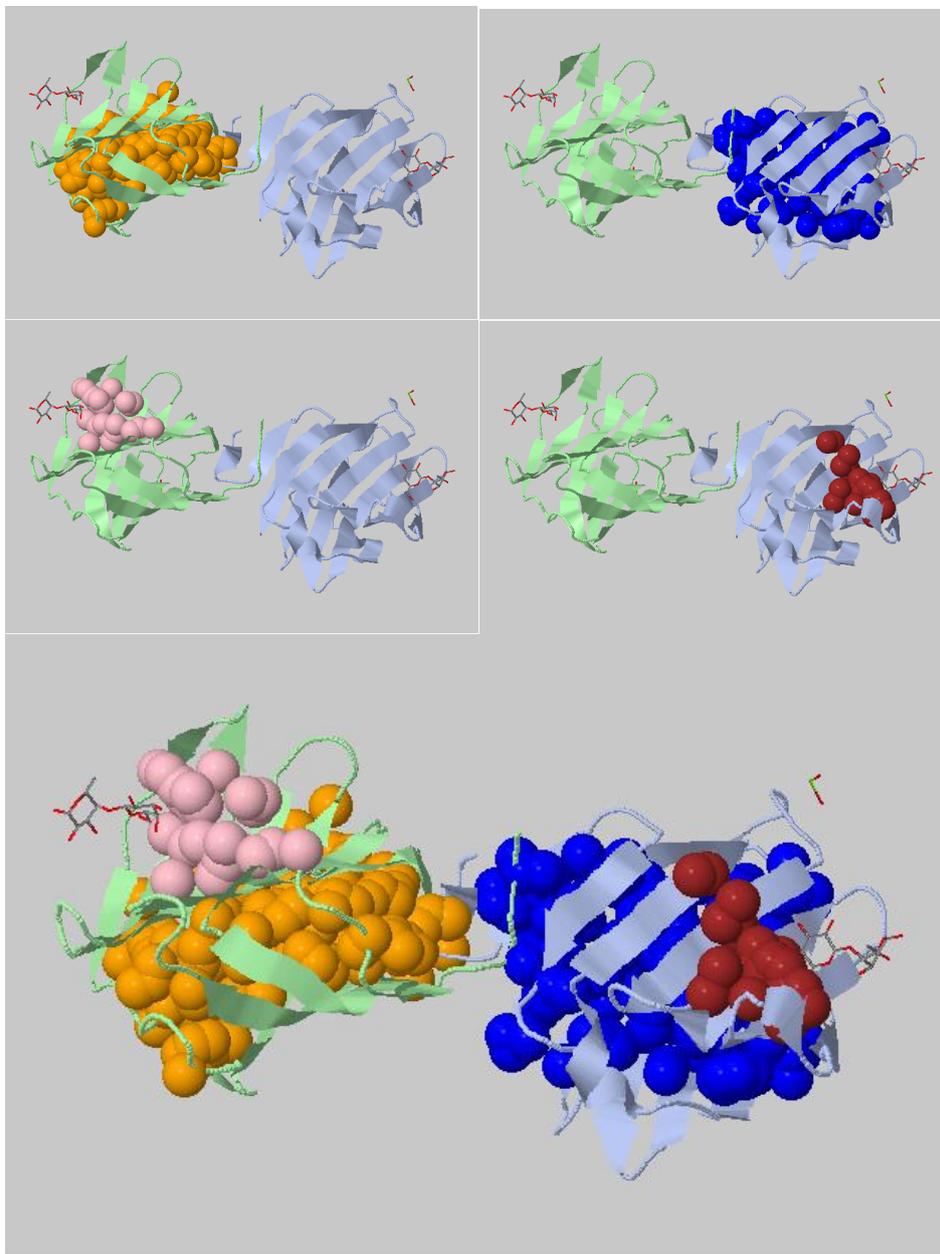


Рис.1. Гидрофобные кластеры в структуре 3VV1. Разные субъединицы показаны разными цветами.

Можно заметить, что найденные кластеры соответствуют элементам вторичной структуры белка совместно с участками контакта мономеров и не участвует в связывании лиганда и соседних молекул в кристалле.

Гидрофобные кластеры контактов мономеров можно видеть в модели 1NSL (значения для порога расстояния и размера кластера – 4.8 и 10, соответственно):

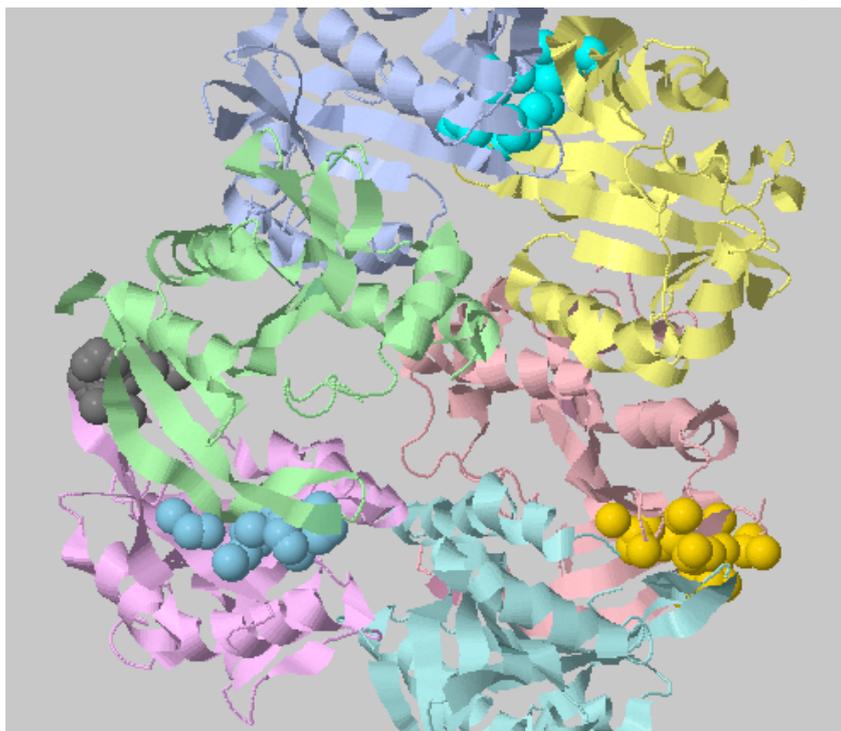


Рис.2. Гидрофобные кластеры контактов мономеров в структуре 1NSL. Разные субъединицы показаны разными цветами.