

Демонстрация умений

Задание d4: построение и раскраска поверхности

Изображение поверхности контактов

На Рис.1А показана молекулярная поверхность объекта, представляющего собой множество атомов одного из мономеров, расположенных на расстоянии $< 5 \text{ \AA}$ от атомов другого мономера. На Рис.1Б показана молекулярная поверхность объекта, представляющего собой множество атомов белковых цепей, расположенных на расстоянии $< 5 \text{ \AA}$ от атомов двойной спирали ДНК. Рис.1В демонстрирует молекулярную поверхность объекта, который является множеством атомов ДНК, расположенных на расстоянии $< 5 \text{ \AA}$ от атомов белка.

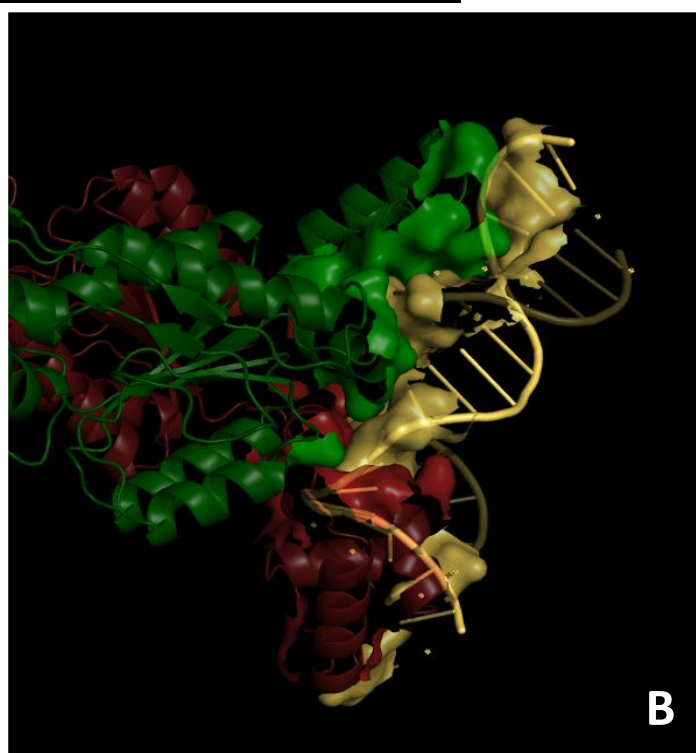
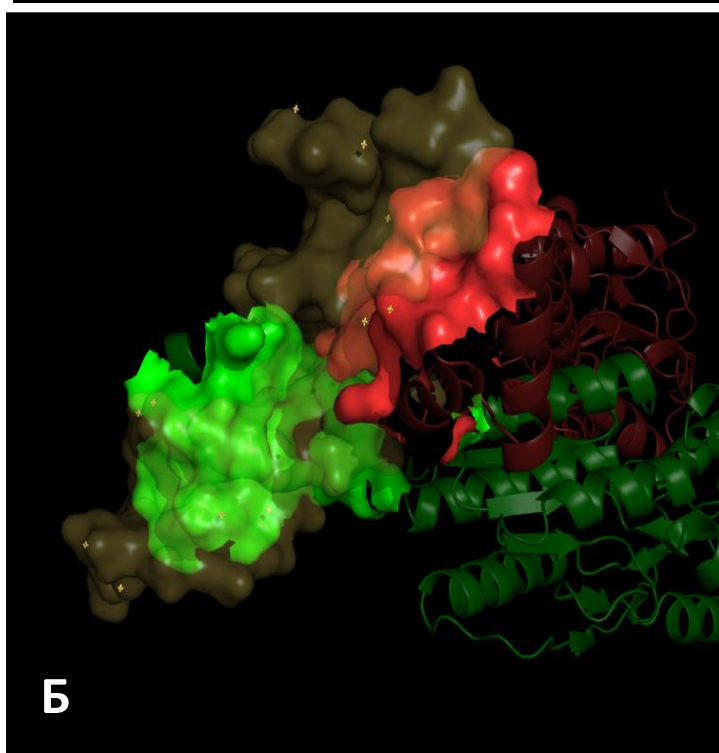
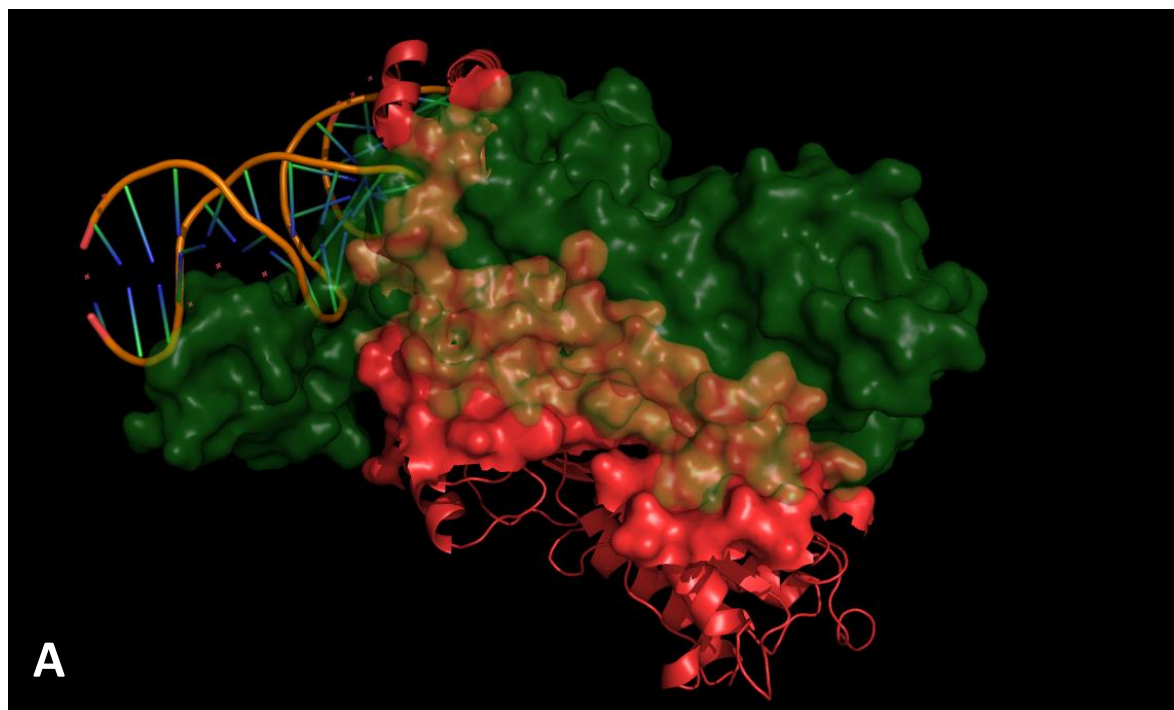


Рис.1. Изображение поверхностей межсубъединичных контактов в структуре 1BDH. (А) Контакт между белковыми мономерами; (Б, В) Контакты между белком и ДНК (в случае Б поверхность дана на фоне остовов контактирующих остатков белка, в случае В – на фоне двойной спирали ДНК).

Раскраска части поверхности

Для поиска гидрофобных кластеров был использован алгоритм CluD (порог на расстояние – 4,8 Å, порог на количество атомов – 10). При этом, перед поиском были изменены идентификаторы цепей одной из асимметрических ячеек во избежание повторений (с А и В на С и D соответственно). В результате было найдено несколько кластеров, относящихся к гидрофобным контактам между белковыми субъединицами (Рис.2).

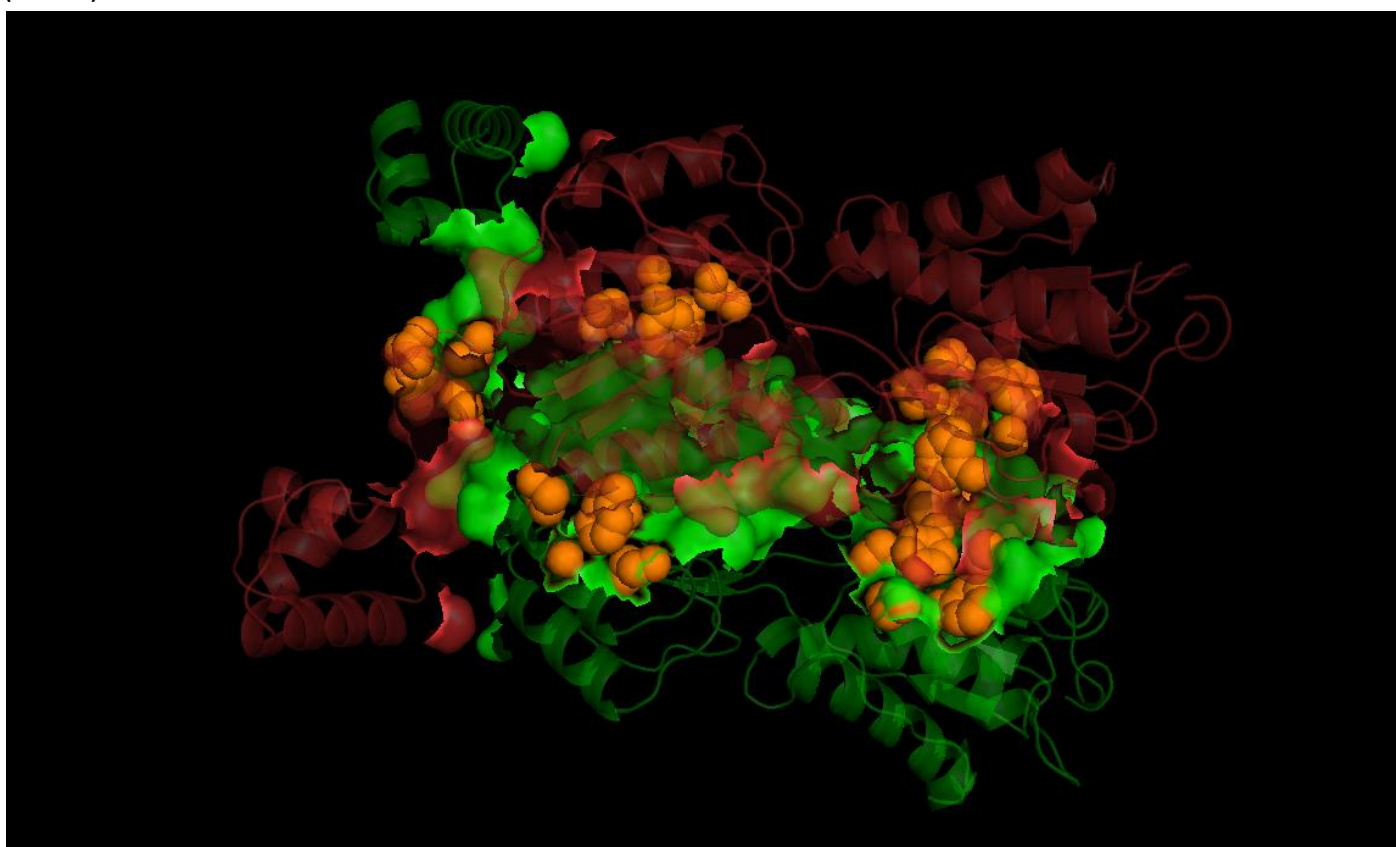


Рис.2. Гидрофобные кластеры в структуре 1BDH. Красным и зеленым выделены субъединицы, оранжевым – атомы гидрофобных ядер и межсубъединичных контактов.