

Занятие 1. Электронная плотность.

1. Выбор структуры белка для дальнейшей работы

Для работы была выбрана структура углеводсвязывающегося белка галектина LEC-6, являющегося гомодимером (PDB-код: 3VV1). PDB-код был найден в базе данных EDS (<http://eds.bmc.uu.se/cgi-bin/eds/uusfs?pdbCode=3vv1>).

Кроме того, поиск с помощью сервиса PDBeFold выявил 621 гомолог выбранной структуры (по обеим цепям), удовлетворяющие критерию по N_align (0,7-0,9 от длины исходного белка; в данном случае 251-451 аминокислотных остатка).

Examined 103369 entries, (275504 chains). Displaying Matches 1-20 of 621.

Sort by arrange by SCOP family match

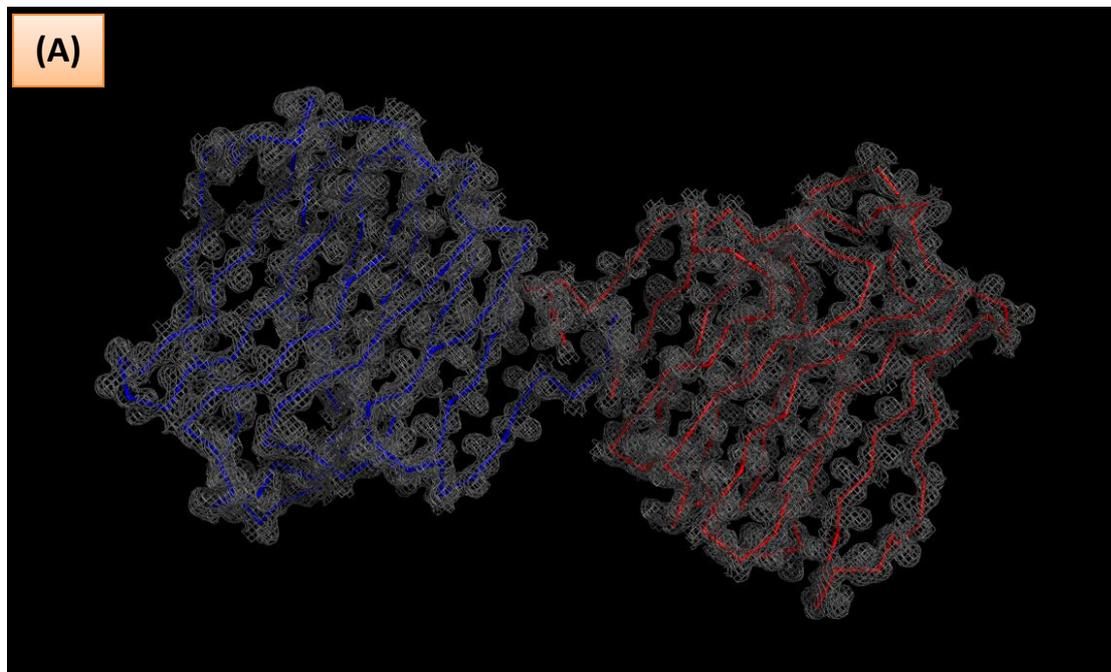
2. Построение изображения электронной плотности вокруг молекулы белка

- Загрузим модель и карту электронной плотности командами «load <расположение файла>\3VV1.pdb, 3VV1» и «load <расположение файла>\3VV1.map, 3VV1_map»

Для удобства оставим только одну цепь гексамера (без гетероатомов) – создадим группу *chain_a* командой «select chain_a, chain a and not het»

- Для визуализации электронной плотности вокруг полипептидной цепи используем команду «isomesh new_map, 3mw9_map, 2, chain_a»

Меняя уровень подрезки электронной плотности, получим следующие изображения (Рис. 1)



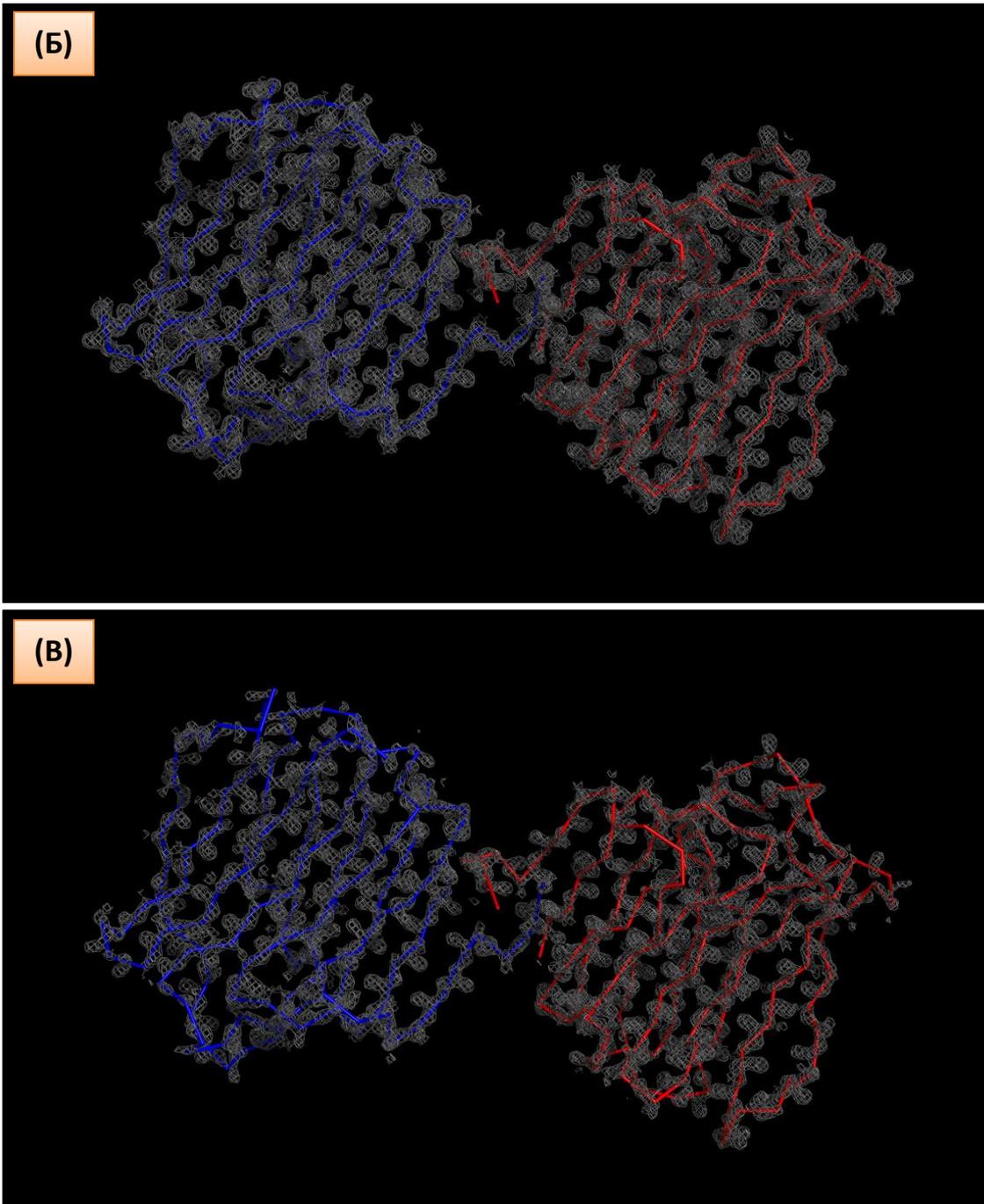


Рис. 1. Распределение электронной плотности в мономере структуры 3MW9. (А, Б, В) Структура остова с картой электронной плотности (уровень подрезки составляет 1,0 (А), 2,0 (Б) и 3,0 (В) соответственно).

Судя по полученным изображениям, модель имеет весьма неплохое качество (что соотносится с указанным в PDB-файле средним разрешением – 1.5 Å), поскольку на уровне подрезки 3,0 (Рис. 1В) карта электронной плотности хорошо соотносится со структурой, образуемой поверхностными остатками в верхней части, как на уровнях подрезки 1,0 и 2,0 модель. Кроме того, были построены изображения электронной плотности с разными уровнями подрезки вокруг пяти разных остатков (Рис. 2). Для начала было задано соответствующее множество, содержащее указанные остатки, командой «*select 93-97, resi 93-97 and chain a*», затем использованы команды «*isomesh resmap, 3mw9_map, <уровень подрезки>, 93-97*».

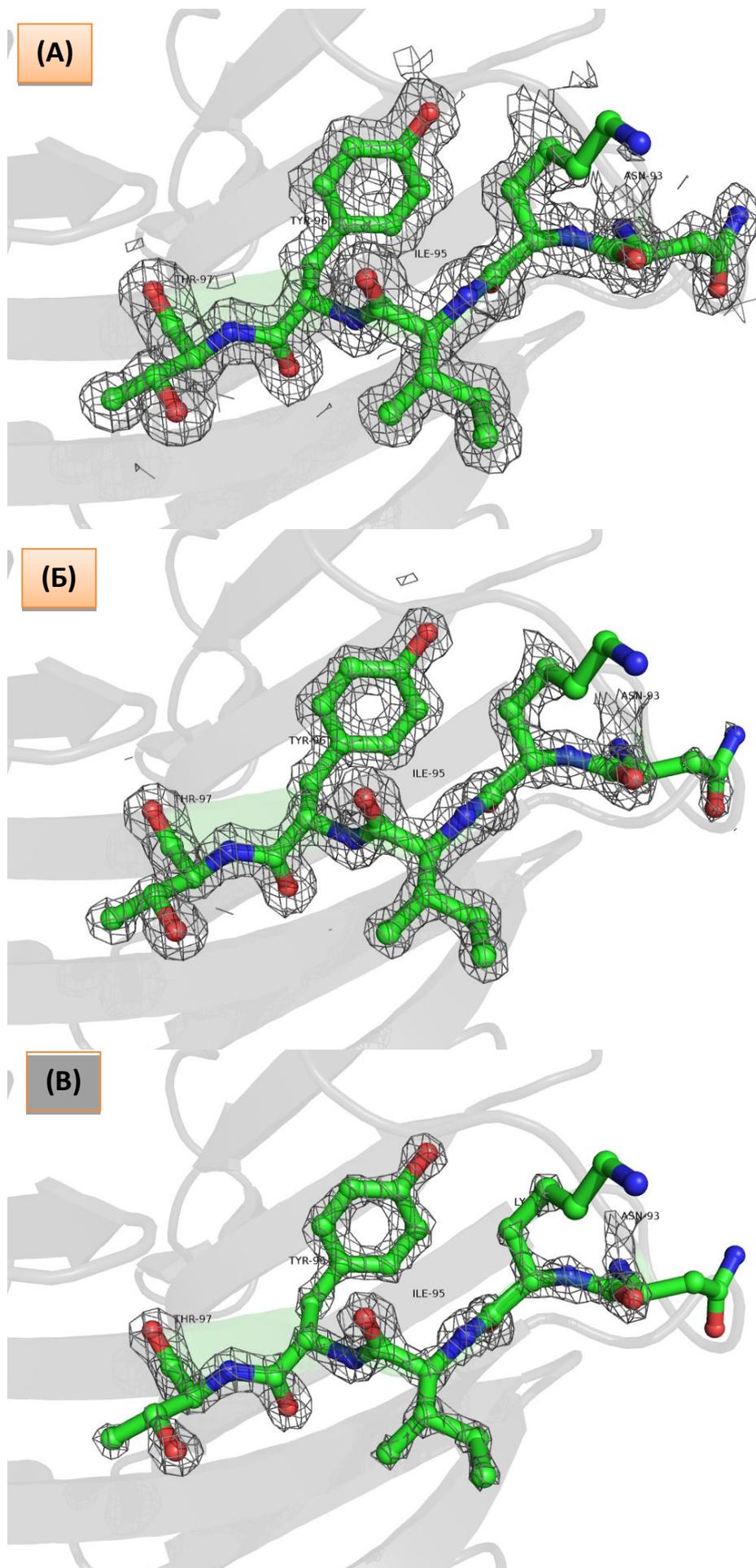


Рис. 2. Распределение электронной плотности вокруг остатков Asn93, Lys94, Ile95, Tyr96, Thr97 структуры 3VV1 (уровень подрезки составляет 1,0 (А), 2,0 (Б) и 3,0 (В) соответственно).