

Занятие 6. ЯМР

1. Запись PDB, полученная методом ЯМР.

Среди структур, решённых методом ЯМР в растворе в 2014 году, была выбрана структура PDB-код: 2ML3. Структура состоит из 20 моделей

В дальнейшем в модели с наименьшей энергией была обнаружена пара остатков Arg74-Glu138, формирующая водородную связь (Рис.1А). Как можно заметить, боковые группы располагаются близко всё время, лишь незначительно изменив расположение в двадцатой модели (Рис.1Б), причем этого достаточно, чтобы потерять водородную связь (на линию между азотом и кислородом должен ложиться водород, но плоские амино- и карбоксильная группа параллельны).

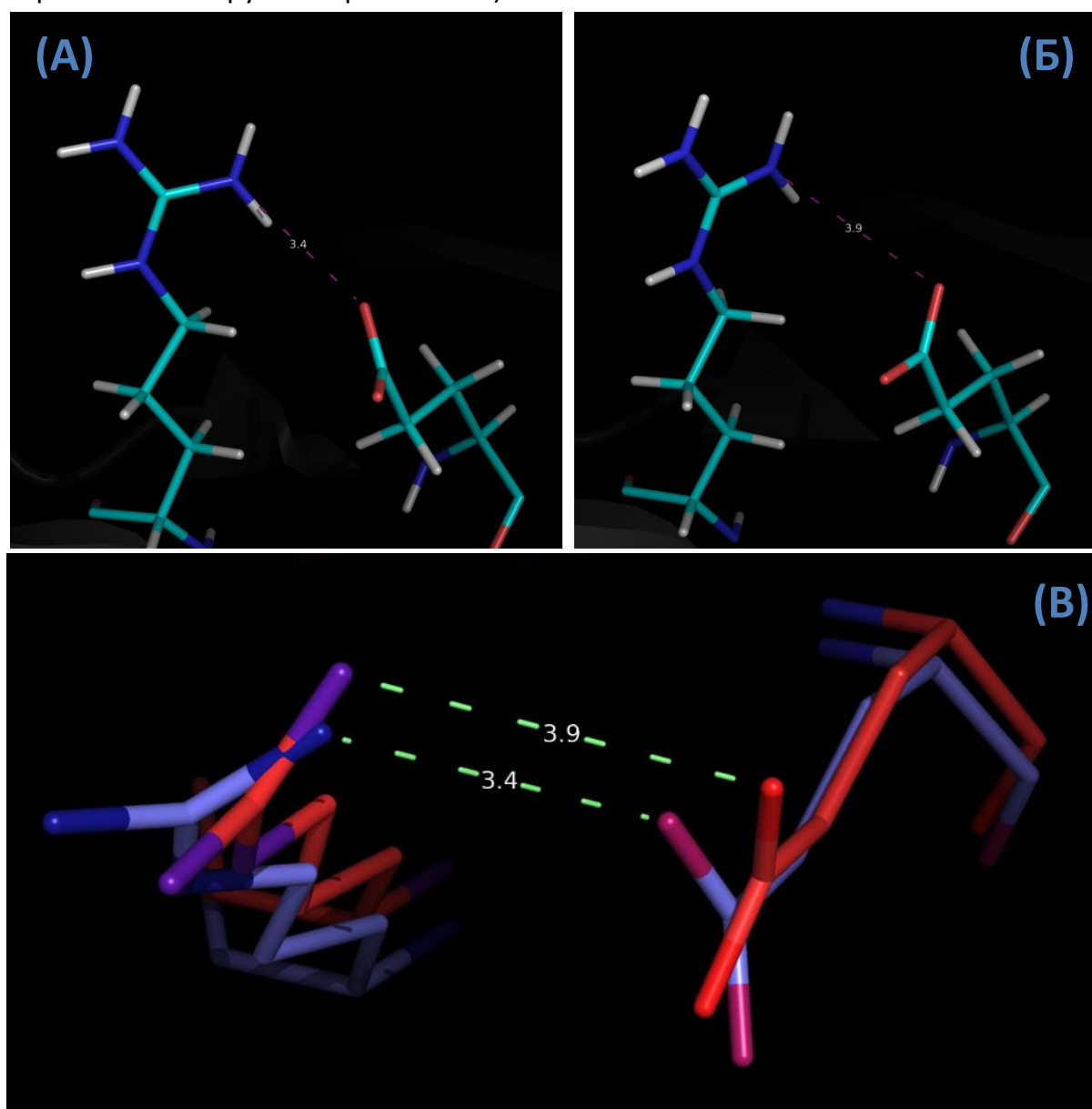


Рис.1. Участок структуры 2ML3. Электростатическое взаимодействие заряженных аминокислот в первой модели (А), в двадцатой модели (Б); совместное представление предыдущих моделей (В).

2. Биологические единицы

В качестве структуры, содержащей 2 субъединицы в асимметрической ячейке и 4 субъединицы – в биологической была выбрана структура каспазы-3 (PDB-код: 4QTY) (Рис.2).



Рис.2. Структура каспазы-3 (PDB-код: 4QTY). Разные ассиметрические ячейки показаны разными цветами; разные субъединицы в одной ячейке – оттенками одного цвета.

В структуре можно видеть, что водородные связи между субъединицами в разных ассиметрических ячейках нет, есть только электростатические взаимодействия (Рис.3).

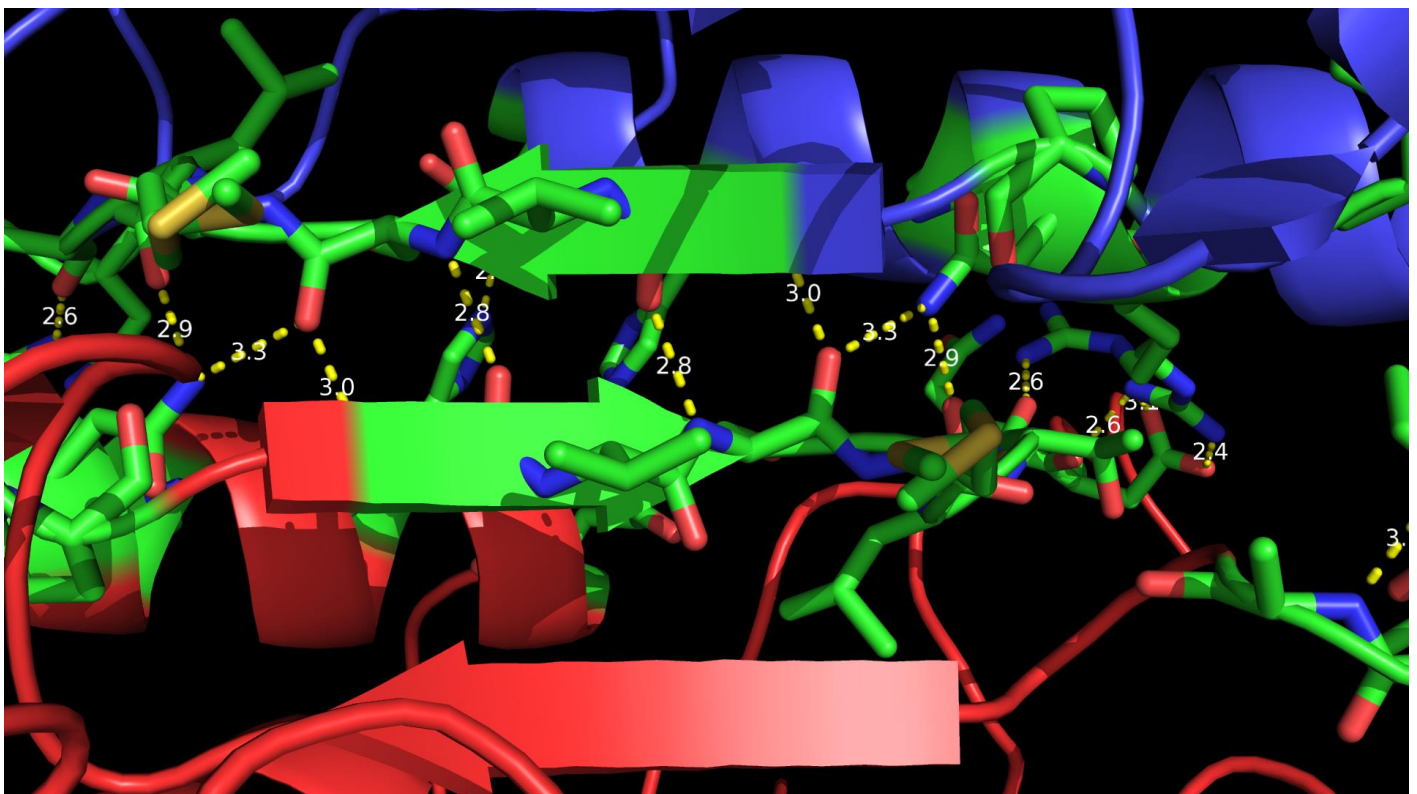


Рис.3. Участок контакта субъединиц в двух ассиметрических ячейках структуры 4QTY.