

1. Странности в указанных PDB файлах

1.1. 7GPB

Модель структуры выглядит нормально. Однако при рассмотрении структуры триптофанов один из них имеет странное положение (Рис.1). Его индольное кольцо не располагается в одной плоскости, как это должно быть для ароматических структур, а «изогнуто» между шести- и пятичленным циклами.

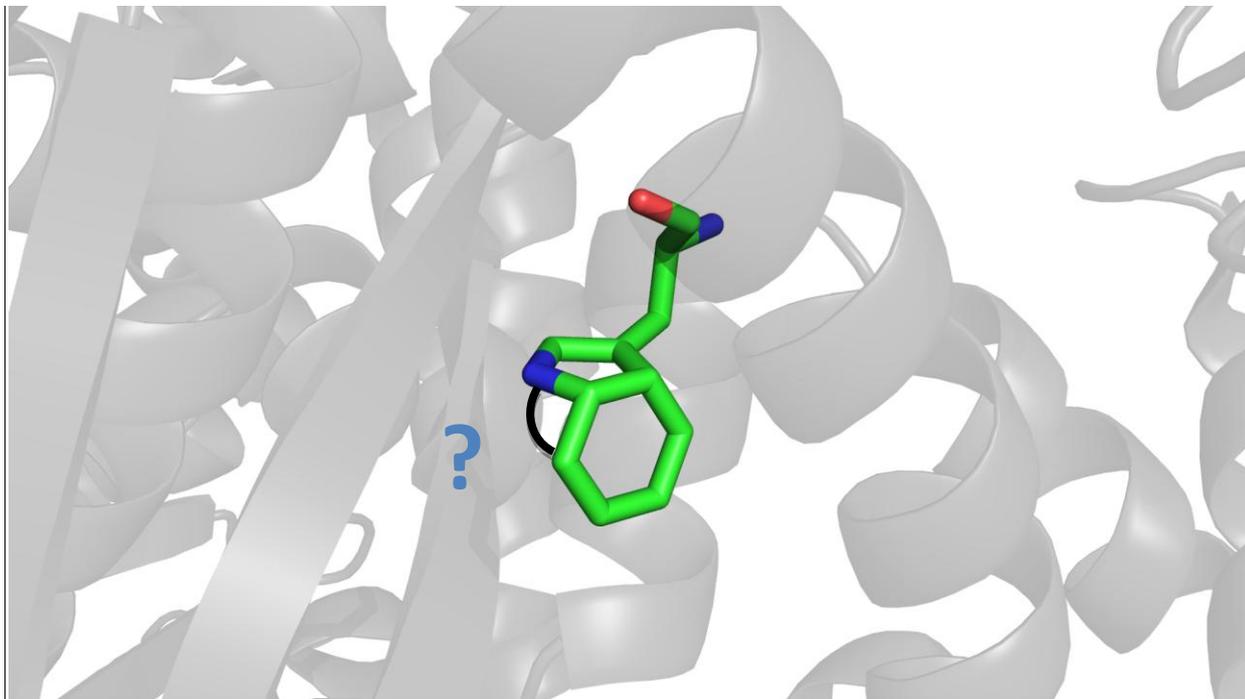


Рис.1. Структура Trp67 в цепи А гликогенфосфорилазы (PDB-код: 7GPB).

В дальнейшем выяснилось, что для данной структуры отсутствует карта электронной плотности и файл структурных факторов. При рассмотрении PDB-файла в разделе “REMARK” практически не было данных о проведении эксперимента: кроме разрешения и R-фактора никаких данных практически не указано. В общем, неясно как авторы построили эту структуру, и откуда у них появились такие триптофаны.

```
REMARK 3 DATA USED IN REFINEMENT.
REMARK 3 RESOLUTION RANGE HIGH (ANGSTROMS) : 2.90
REMARK 3 RESOLUTION RANGE LOW (ANGSTROMS) : NULL
REMARK 3 DATA CUTOFF (SIGMA (F)) : NULL
REMARK 3 DATA CUTOFF HIGH (ABS (F)) : NULL
REMARK 3 DATA CUTOFF LOW (ABS (F)) : NULL
REMARK 3 COMPLETENESS (WORKING+TEST) (%) : NULL
REMARK 3 NUMBER OF REFLECTIONS : NULL
REMARK 3
REMARK 3 FIT TO DATA USED IN REFINEMENT.
REMARK 3 CROSS-VALIDATION METHOD : NULL
REMARK 3 FREE R VALUE TEST SET SELECTION : NULL
REMARK 3 R VALUE (WORKING SET) : 0.171
REMARK 3 FREE R VALUE : NULL
REMARK 3 FREE R VALUE TEST SET SIZE (%) : NULL
REMARK 3 FREE R VALUE TEST SET COUNT : NULL
REMARK 3 ESTIMATED ERROR OF FREE R VALUE : NULL
```

1.2. 1GT0

В имеющейся структуре участок цепи С с номерами остатков 78-96 отсутствует (Рис.2). Данные остатки указаны как отсутствующие и в самом PDB-файле.

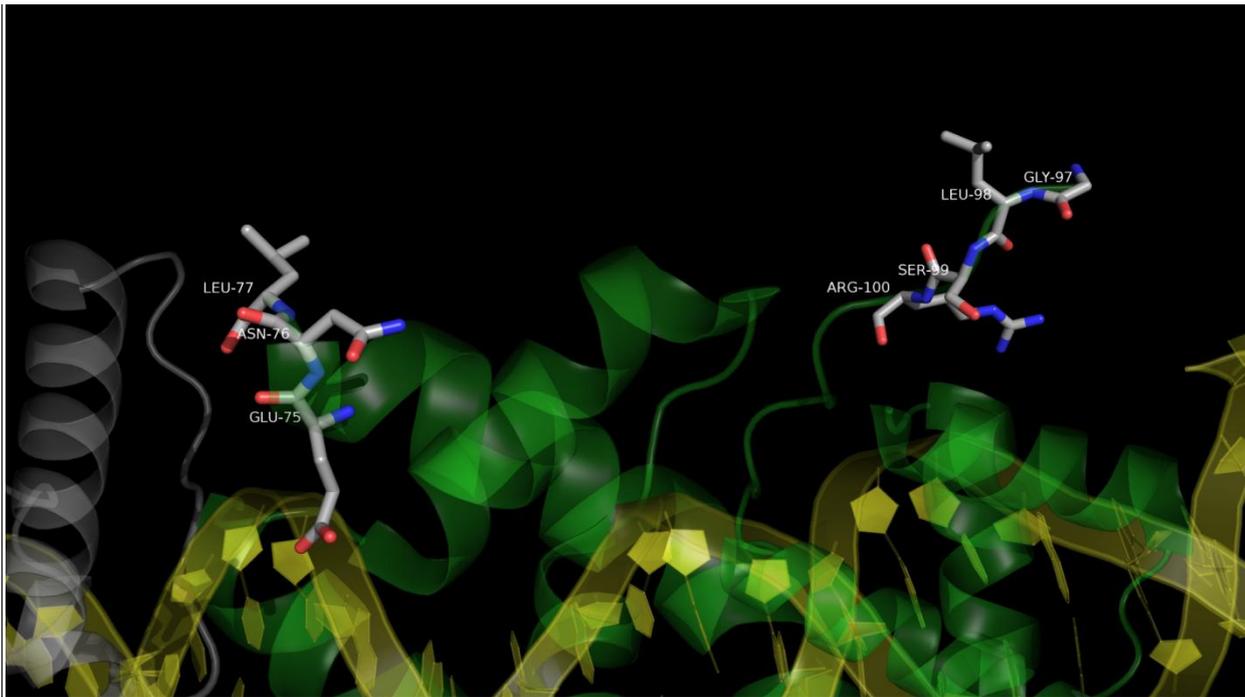


Рис.2. Участок структуры ДНК-белкового комплекса (PDB-код: 1GT0).

Между остатками 75-77 и 97-100 имеется область электронной плотности. Однако её образует комплекс в соседней ячейке (Рис.3). Судя по всему, искомый «линкер» (остатки 78-96) просто является подвижной петлёй, поэтому плохо кристаллизуется, поскольку при низком уровне подрезки видны некоторые «области», вероятно образованные некими атомами из отсутствующих остатков.

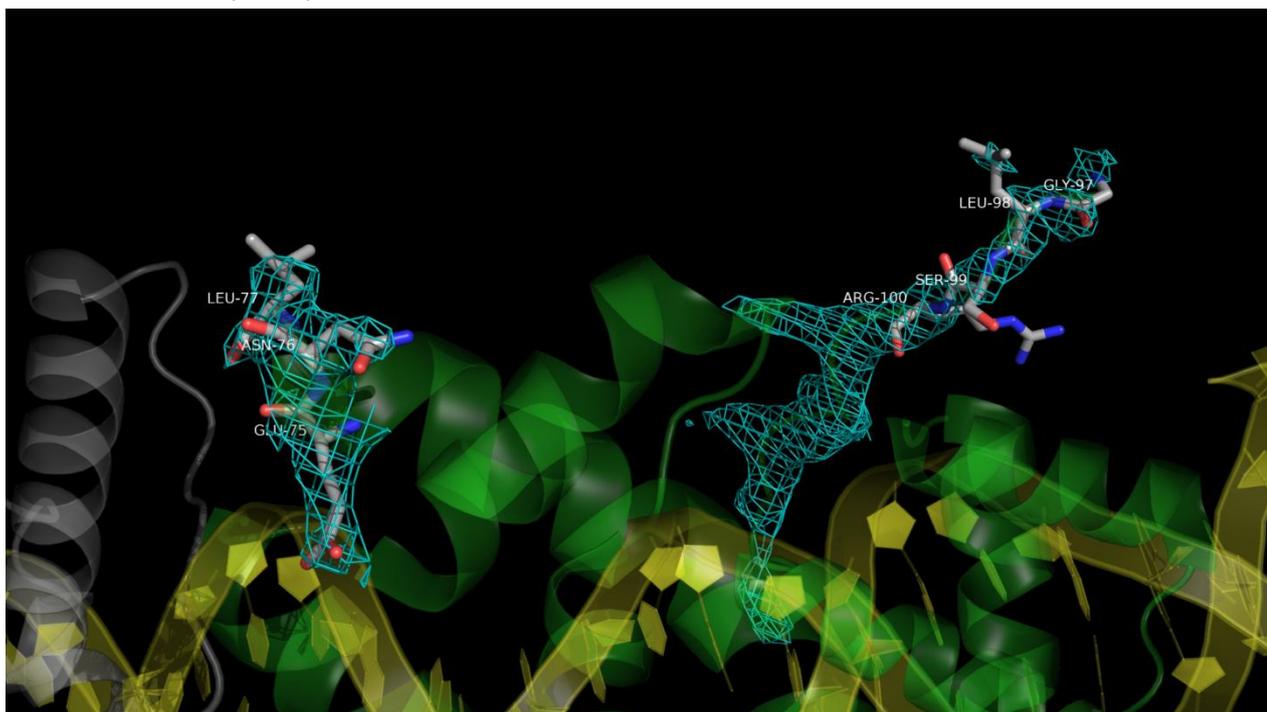


Рис.3. Участок контакта соседних ячеек в структуре ДНК-белкового комплекса (PDB-код: 1GT0). Белковые молекулы в разных ячейках показаны зелёным и серым цветами.

1.3. 2B5A

В трёх из четырёх мономеров структуры остатки Asn21 фиксированы, но в оставшемся мономере (цепь С) остаток Asn21 имеет две альтернативные конформации (Рис.4). В PDB-файле все атомы боковой группы данного остатка для каждой конформации имеют коэффициент заполнения, равный 0,5.

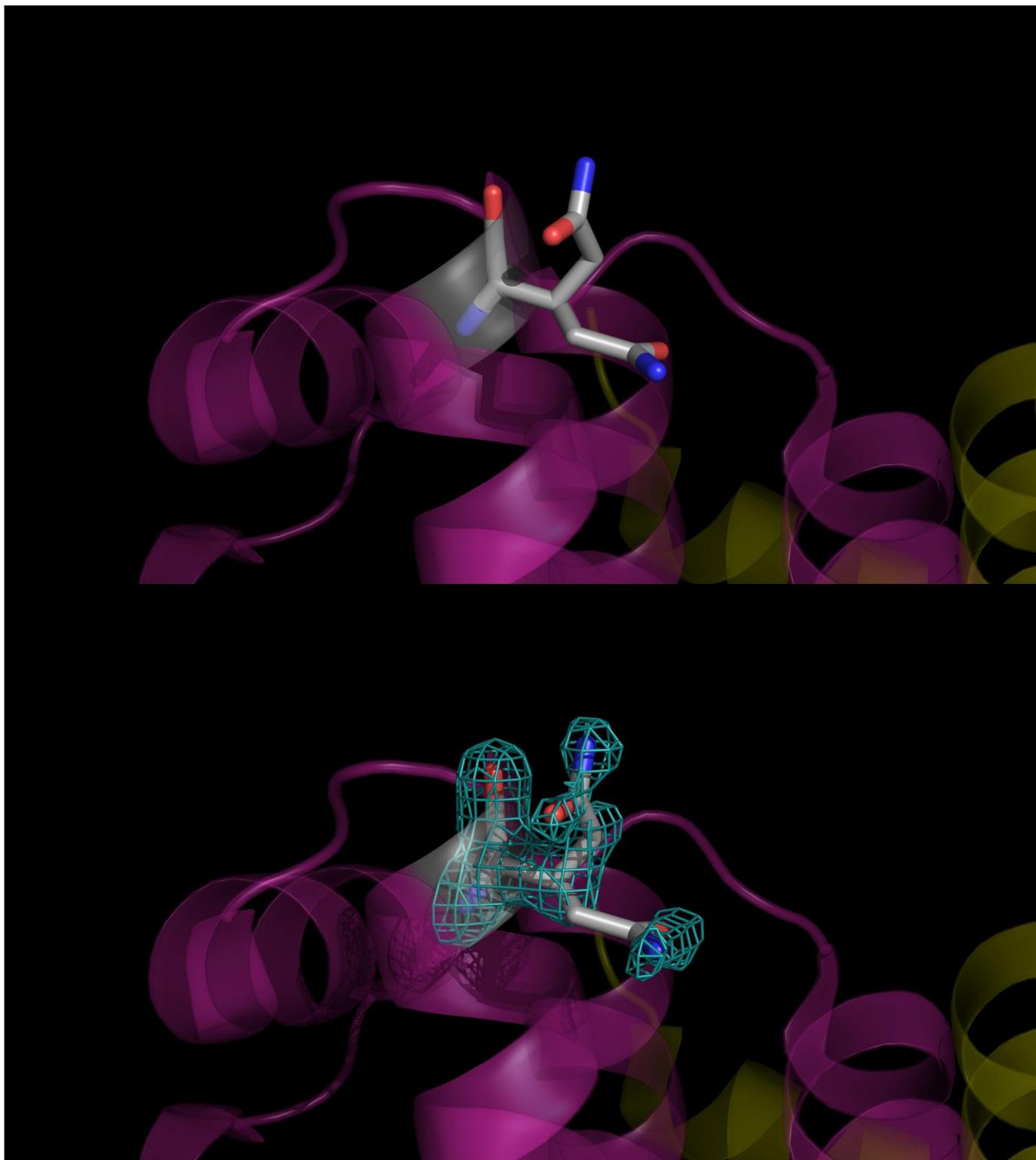


Рис.4. Структура Gln21 цепи С белка C.BclI (PDB-код: 2B5A) и его электронная плотность.

Объясняется это может тем, что данный остаток имеет, согласно базе PDBREPORT, «необычное пространственное окружение

2. Сравнение структур атомного и среднего разрешения

В качестве структуры среднего разрешения была выбрана структура искусственного пептид-связывающего белка (PDB-код: 4PLQ), а в качестве структуры атомного разрешения – структура NADH-цитохром b5 редуктазы (PDB-код: 3W5H). Оба белка - мономеры, длины равны соответственно 284 и 272 аминокислот.

Таблица 1. Сравнительная характеристика качества структур среднего (4PLQ, 2.1 Å) и атомного (3W5H, 0.78 Å) разрешения.

Характеристика	4PLQ, 2.1 Å	3W5H, 0.78 Å
Число атомов в структуре без гетероатомов (число «неводородных» атомов)	2086 (2086)	3254 (2160)
% атомов, имеющие альтернативные конформации (коэффициент заполнения < 1)	0	9.9
% атомов с температурным фактором > 30	83.4	3.2
Среднее темп. фактора.	41.46	10.92
Ст. откл. темп. фактора	14.15	8.08

Таким образом, в атомной структуре положения атомов в белке более фиксированы (поскольку практически нет белковых атомов с высоким температурным фактором); с другой стороны, число атомов, имеющих альтернативные конформации, больше в атомной структуре, т.е. какая-то неоднозначность все же сохраняется.