

# Практикум 2

## Задание 1

ЭП: хорошая и плохая расшифровки

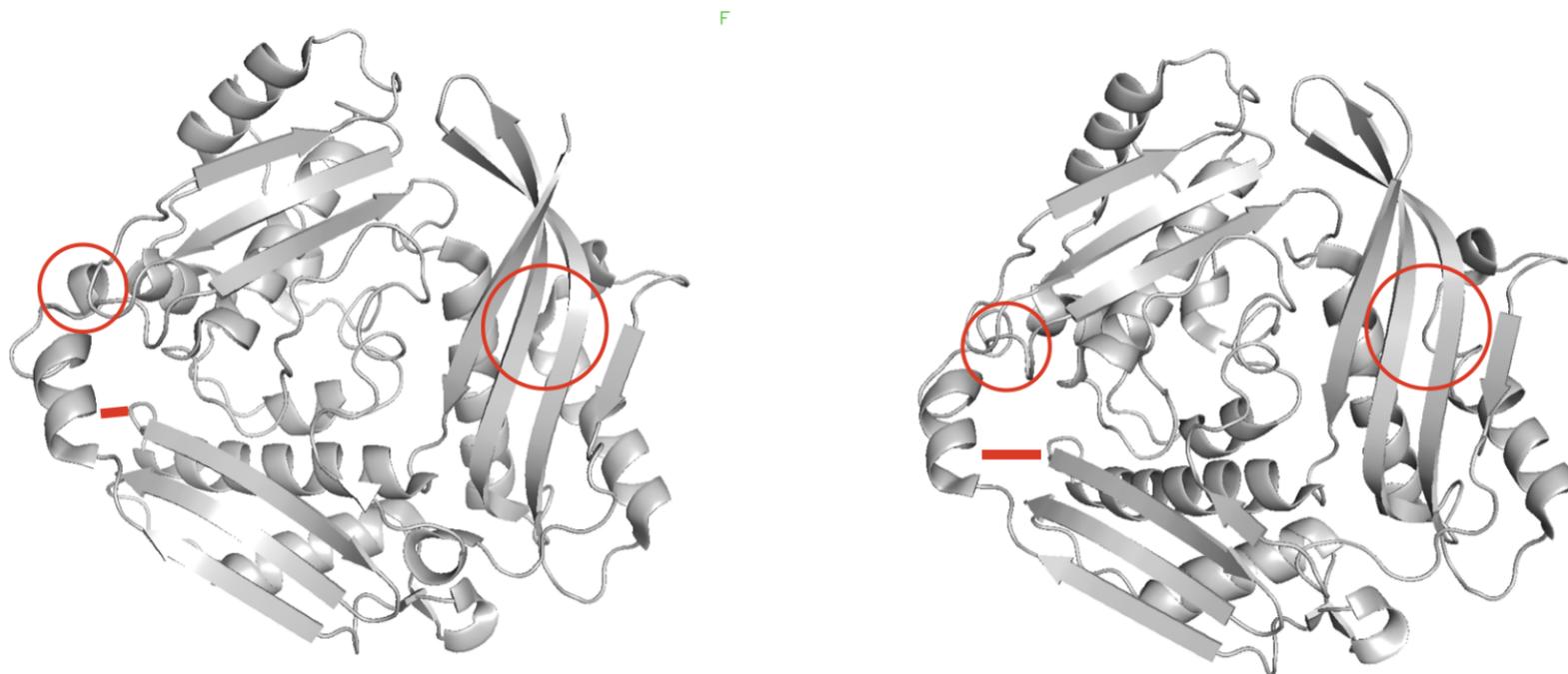


Рис 1, 2: сравнение структур 7BHS (слева) и 6FBN (справа). Если долго рассматривать две эти структуры, можно заметить, что в структуре 7BHS в некоторых местах находятся структурированные участки там, где в 6FBN участки неструктурированные. Это наталкивает на мысль о том, что качество структуры 6FBN хуже.

В данном задании предлагается сравнить две кристаллографические расшифровки одного и того же белка: метионин-аденозилтрансферазы человека. На вид две структуры довольно сильно отличаются друг от друга, но из описания на сайте PDB следует, что 7BHS составлен из одной цепи, в то же время 6FBN - из двух. Не зная этого я предположила, что качество модели 7BHS совсем плохое. После сокрытия второй цепи структуры 6FBN различие становится не таким очевидным. (В структуре 6FBN две цепи - два белка).

For Educational Use Only

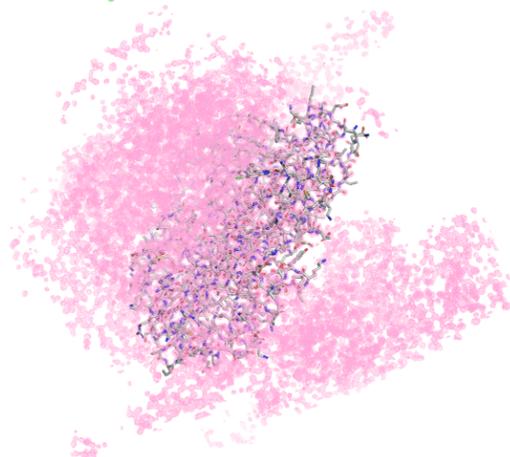


Рис.3. 7BHS, общий вид + mesh

For Educational Use Only

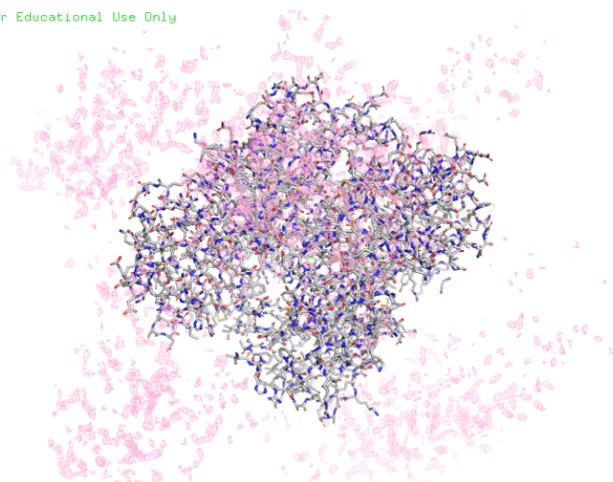


Рис.4. 6FBN, общий вид + mesh

После визуализации карты электронной плотности ситуация стала намного более понятной: у структуры 7BHS много плотных областей, что свидетельствует о высоком качестве расшифровки. Структуры окружены 4мя облаками по краям - это плотности белков, находящихся по соседству от рассматриваемой кристаллографической ячейки.

For Educational Use Only

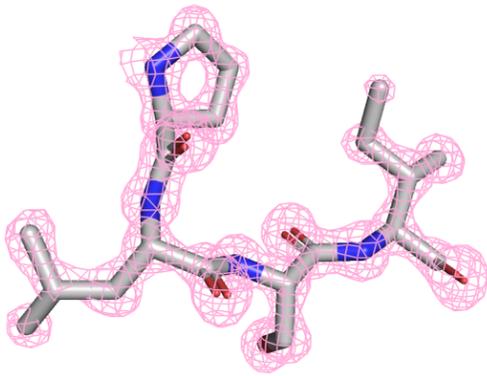


Рис.5. 7BHS, isomesh, 327-330 остатки (подрезка = 2, carve = 2)

For Educational Use Only

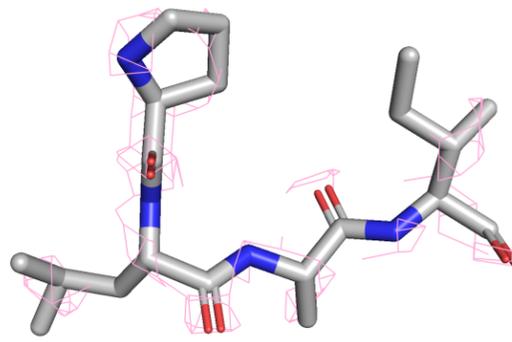


Рис.6. 6FBN, isomesh, 327-330 остатки (подрезка = 2, carve = 2)

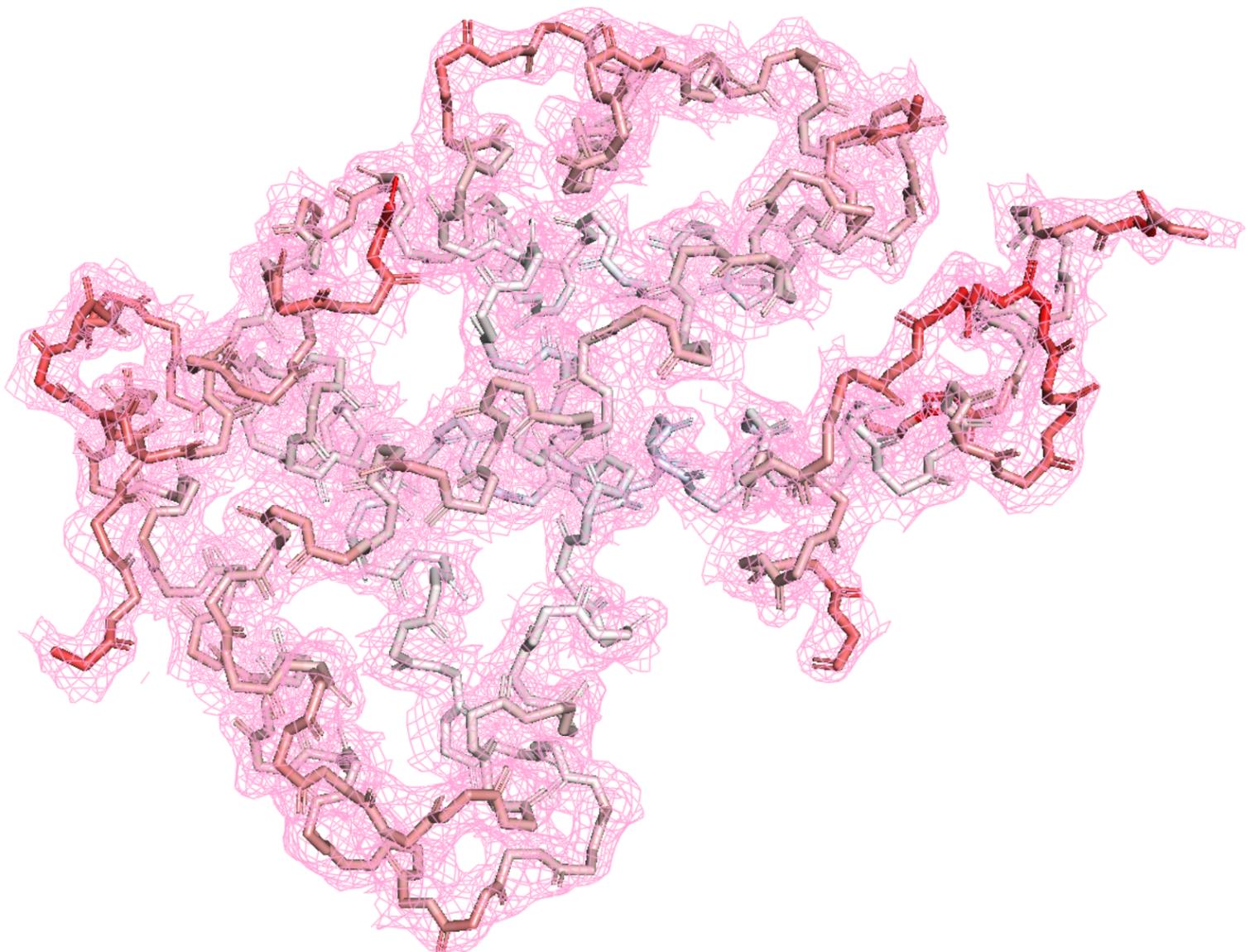
Различие в качестве при более близком приближении становится совершенно очевидным: в структуре 7BHS областей пространства, внутри которой z-score плотности выше или равен 3 много, следовательно, много областей со значимостью различия между сигналом и шумом, которую мы считаем достаточной.

Разрешение 7BHS = 1.05 Å, 6FBN = 2.70 Å, следовательно, мои умозаключения валидны.

## Задание 2

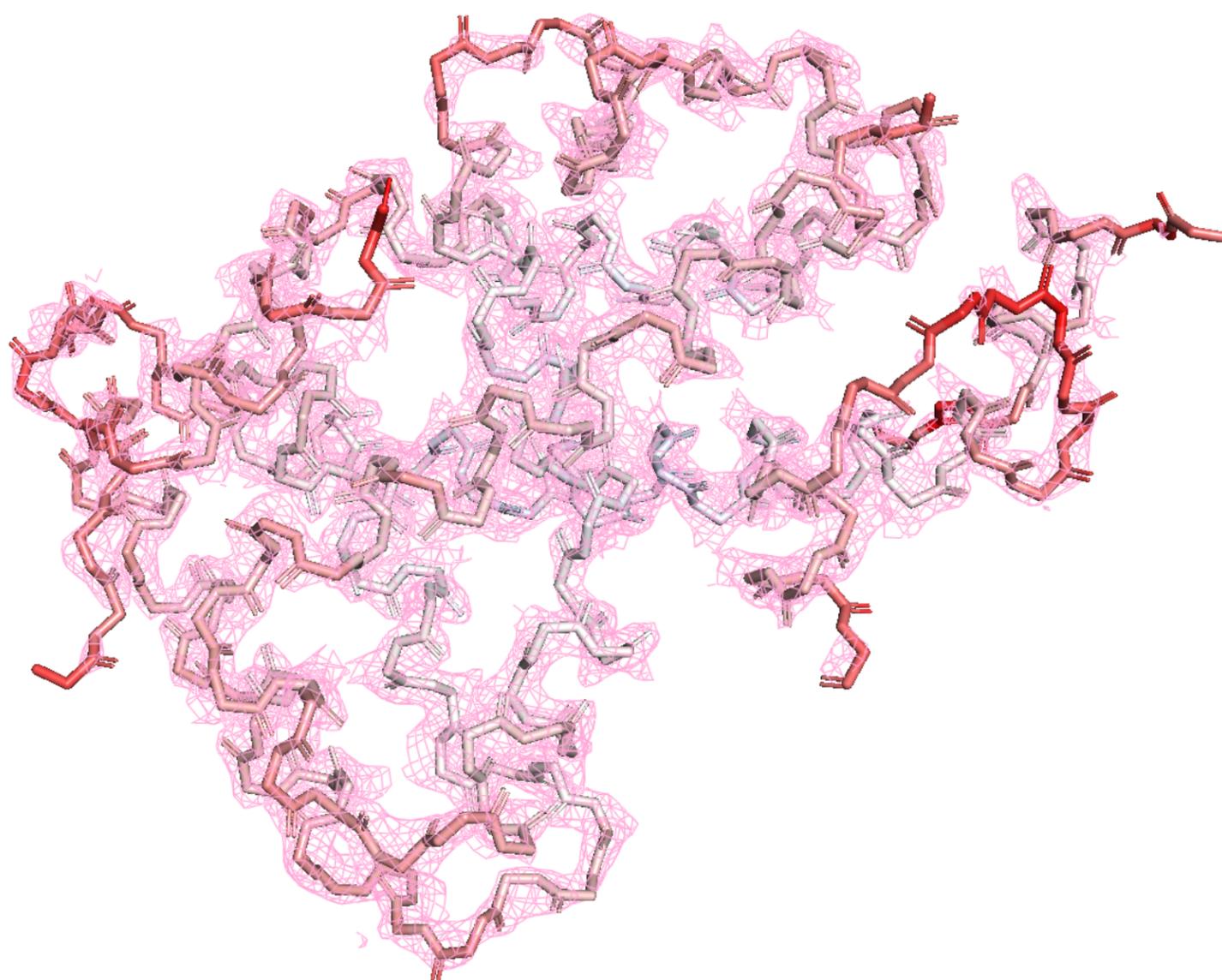
### ЭП и положение в структуре

For Educational Use Only



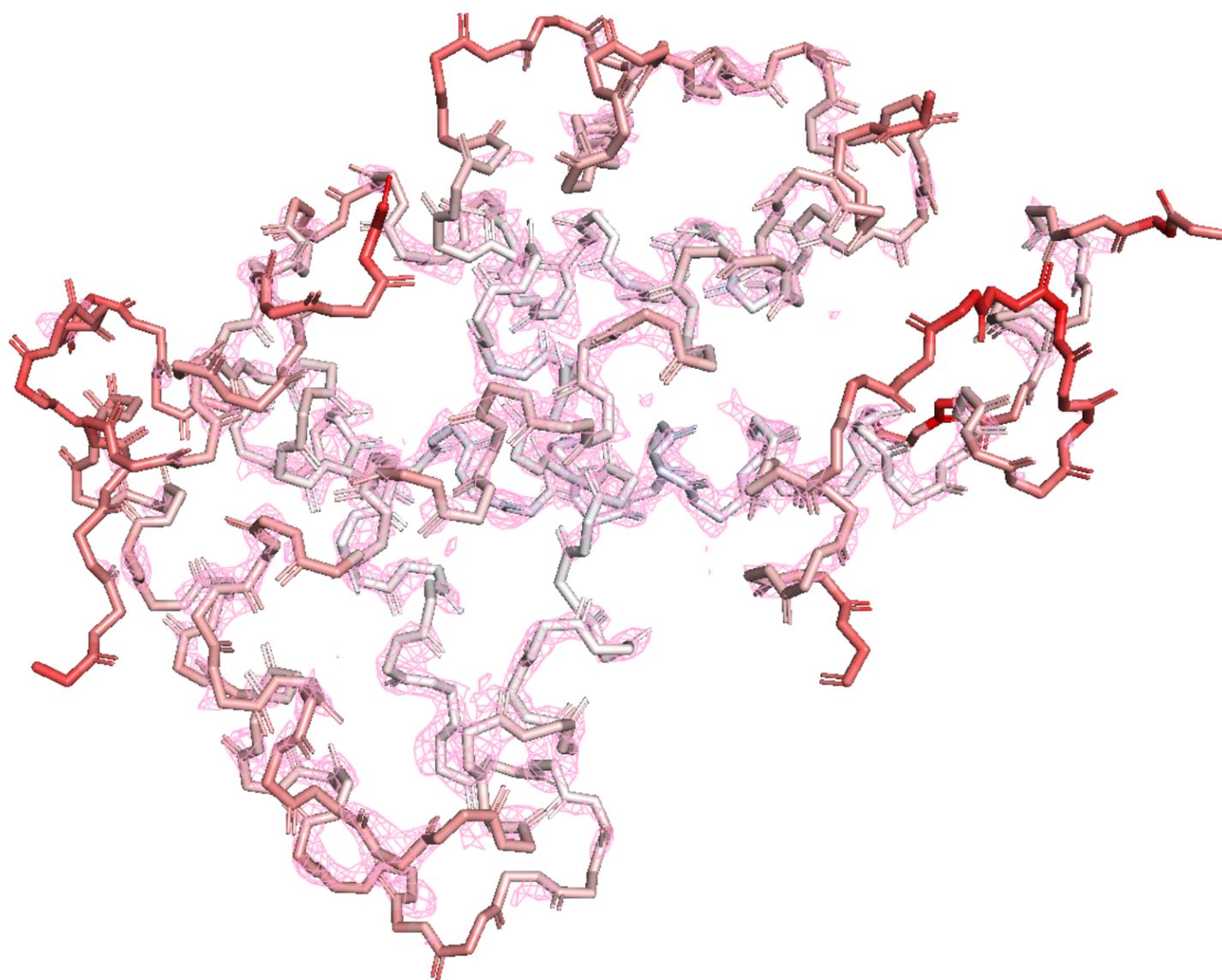
Подрезка = 1, carve = 2

For Educational Use Only



Подрезка = 2, carve = 2

For Educational Use Only



Подрезка = 3, carve = 2

Предлагается рассмотреть белковый остов структуры рецептора ретиноевой кислоты альфа.

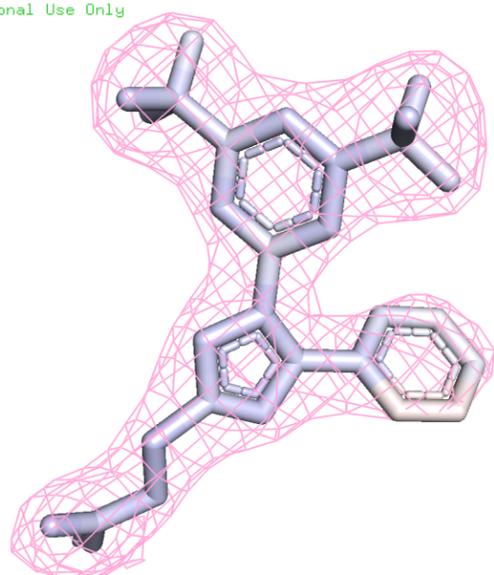
Для наглядности применена покраска остова по градиенту значения В-фактора (подробнее о нем в 3м практикуме). С увеличением уровня подрезки электронная плотность на наиболее подвижных участках не определена (коррелирует со значением В-фактора). Видно, что и N, и С-конец структуры более подвижны. В том числе, белок не сильно структурирован сам по себе.

## Задание 3

### ЭП и типы атомов

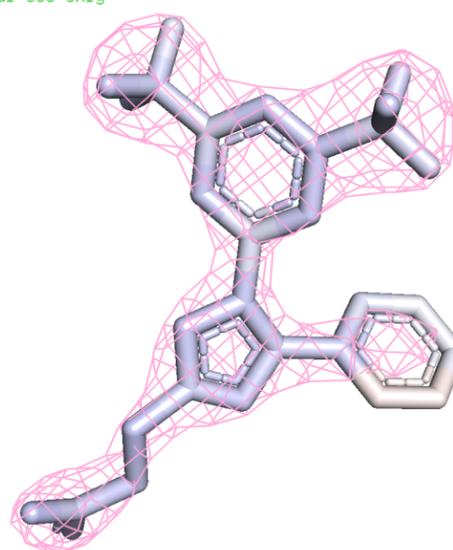
Предлагается рассмотреть лиганд предыдущей структуры.

For Educational Use Only



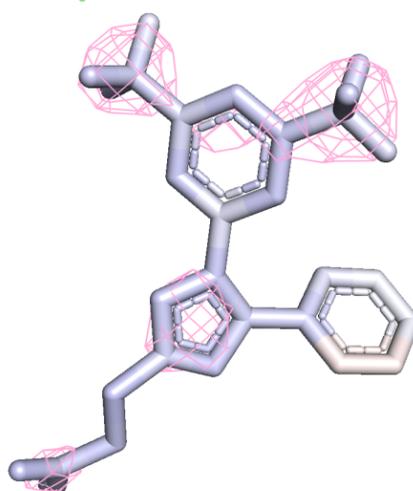
Подрезка = 1, carve = 2

For Educational Use Only

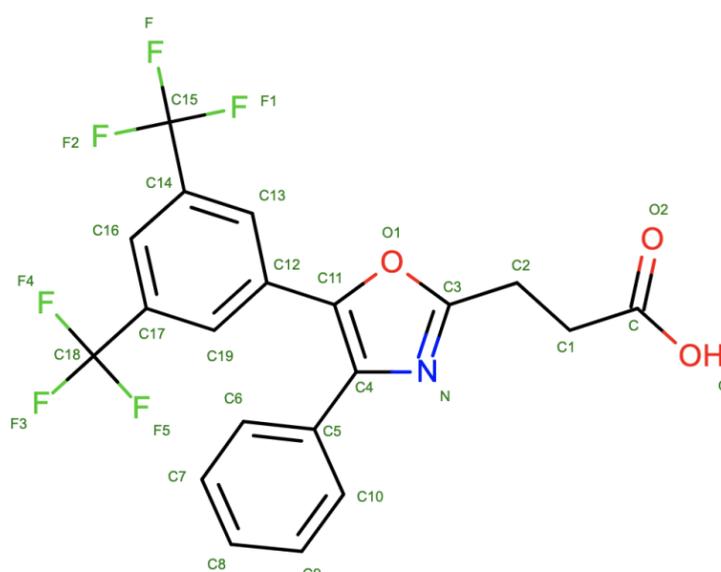


Подрезка = 2, carve = 2

For Educational Use Only



Подрезка = 3, carve = 2



### Структурная формула ингибитора S169

Покраска снова по В-фактору. Кольцо C5-C10 судя по значениям В-фактора более подвижно, чем вся остальная молекула (вероятнее всего из-за того, что другие области молекулы стабилизируются аминокислотами активного

центра, а это кольцо неполярно и может стабилизироваться стекинггом - его, может, нет, или сила взаимодействия меньше). Ожидаемо электронная плотность для этого кольца определяется хуже из-за его подвижности.

Также видно стягивание электронной плотности к электроотрицательным атомам: двум трифторгруппам, карбоксильной группе и кислороду с азотом оксазольного кольца.