

Вторичная структура

Задание 1. Работа с разметкой вторичной структуры в ручном режиме.

В данном задании использовалась структура из практикума 6 – трипсин (PDB-id 3unr). При помощи 2struc для неё была сгенерирована аннотация вторичной структуры при помощи двух различных алгоритмов: DSSP и STRIDE.

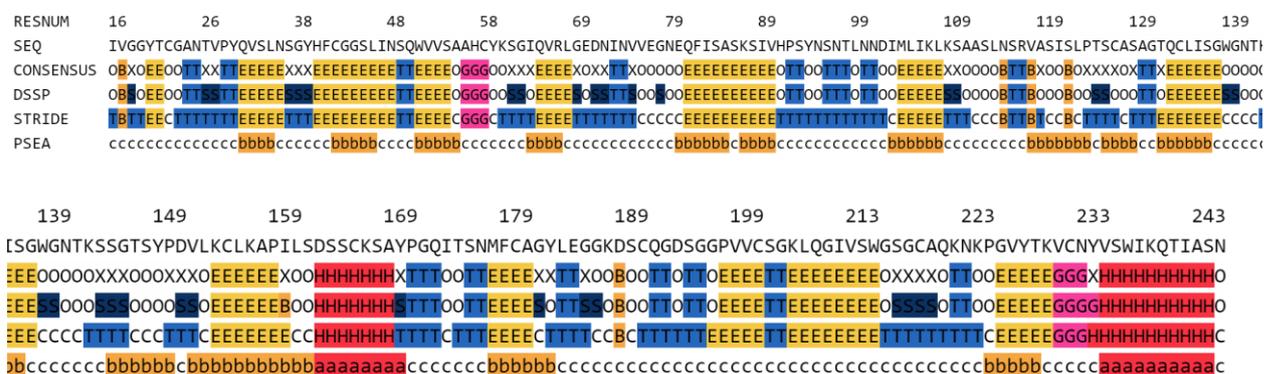


Рисунок 1. Аннотация вторичной структуры при помощи DSSP и STRIDE

В целом, полученные разметки очень похожи, есть совсем немного отличий. Рассмотрим их подробнее.

Участки 1 и 2.

Тут рассмотрим два отличия, так как они связаны. Это позиции Thr 132 и Ile160: Thr132 STRIDE отнес к бета-листу, в то время как DSSP – нет, в то время как Ile160 STRIDE так же относит к бета-листу, а DSSP называет бета-мостиком.



Рисунок 2. Участок несоответствия 1: различное определение треонина 132

э 159
 DVLKCLKAPILSDSSCK
 KXOEEEEEXOOHHHHH
 SSOEEEEEBOOHHHHH
 TTCEEEEEECCHHHHH
 cbbbbbbbbbbbaaaaa

Рисунок 3. Участок несоответствия 2: различное определение изолейцина 160

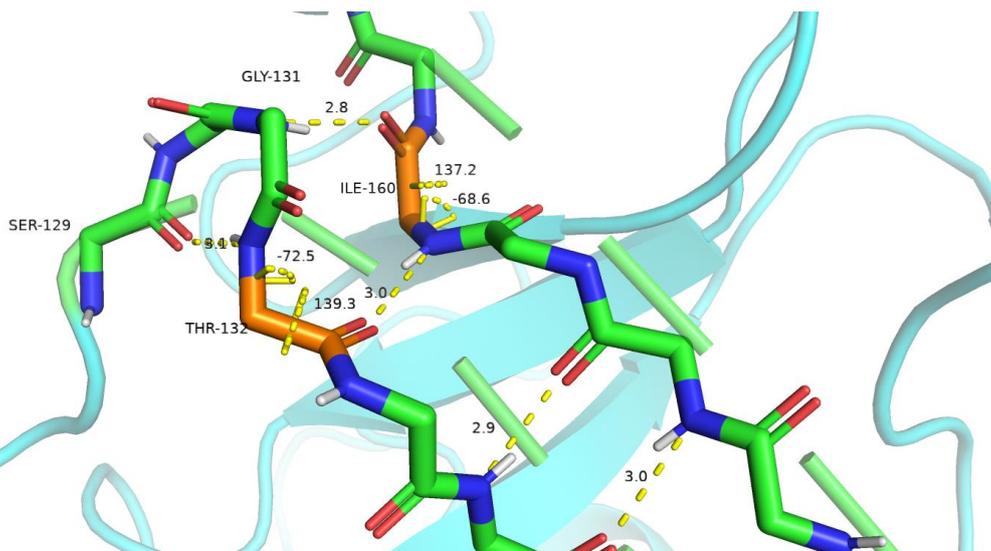


Рисунок 4. Изолейцин 160 и треонин 132

Мы видим, что для каждой из этих аминокислот один из торсионных углов не характерен для β -структуры, они развернуты, а также тоглько одна из водородных связей каждой участвует в бета-листе, а вторая ображена куда-то ещё, для треонина 132 она образована с серином 129 и участвует в образовании изгиба, а для изолейцина она направлена к «не той» аминокислоте, глицину 131, по всей видимости из-за его так же далекого расположения от изолейцина он и был аннотирован как бета-мостик. На мой взгляд, разумно считать эти аминокислоты частью бета-листа, так как именно с их водородной связи он начинается, и все лежащие «дальше» по бета-листу аминокислоты (следующие за треонином 132 и идущие до изолейцина 160) ему принадлежат, хотя, например, 133 и 159 аминокислоты не имеют связей между собой, таким образом, аннотация STRIDE мне кажется более правильной.

PSEA данные участки также относит к бета-листу, однако он также относит к нему и следующие лейцин 161 и серин 162, что на мой взгляд неправильно, лейцин 161 связан всего 1 связью с другими цистеином 180, при этом его

соседи не участвуют в формировании взаимодействий с бета-тяжем этого цистеина, а серин 162 вообще участвует в начале альфа-спирали.

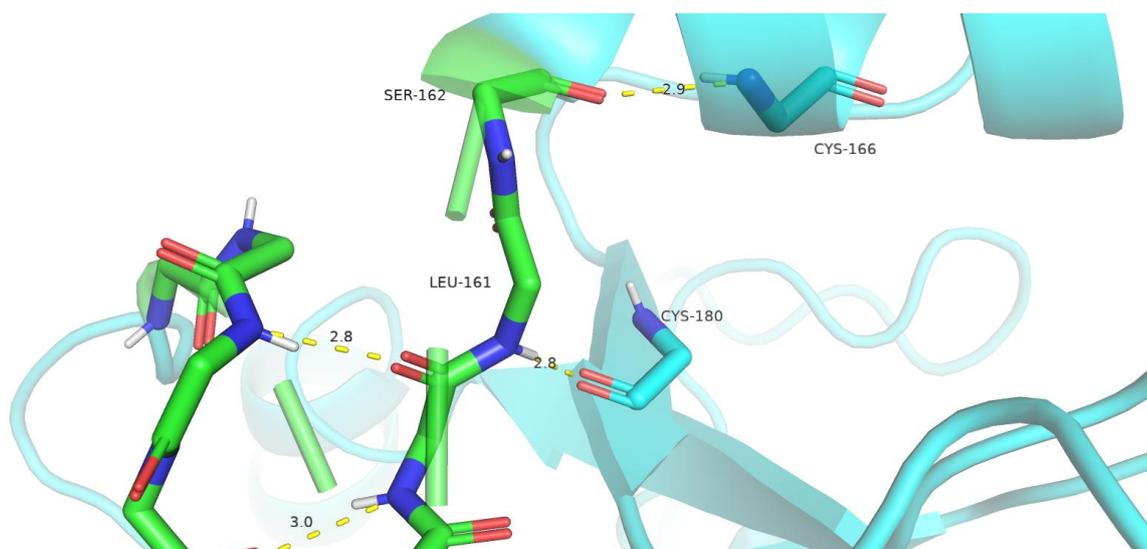


Рисунок 5. Лейцин 161 и серин 162

Участок 3

В качестве третьего участка я рассматривал глицин 197. DSSP не относит его к какой-либо структуре, в то время как STRIDE включает в бета-лист.

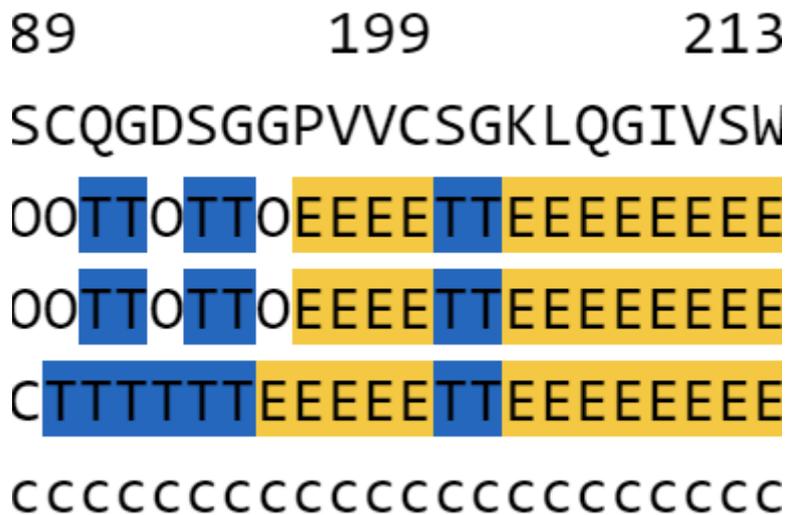


Рисунок 6. Участок несоответствия 3. Различное определение глицина 197

P_{ik} - это propensity аминокислотного остатка i образовывать тип вторичной структуры j

n_{ik} - это количество остатков i в датасете, образующих тип вторичной структуры j

n_i - это общее количество остатков i в датасете

N_k - это общее количество остатков, образующих тип вторичной структуры j во всем датасете

N - это общее количество остатков в датасете

Получились следующие результаты:

Имя остатка	Бета-листы	Альфа-спирали	Петли
G	0,70	0,46	1,50
L	0,95	1,46	0,72
Y	1,85	0,62	0,85
S	0,91	0,67	1,26
E	0,75	1,33	0,90
Q	0,87	1,21	0,92
D	0,61	0,78	1,33
N	0,80	0,55	1,40
F	1,19	0,82	1,03
A	0,79	1,41	0,83
K	1,00	1,02	0,98
R	0,97	1,15	0,92
H	0,88	1,19	0,93
C	0,48	1,17	1,14
V	1,77	0,93	0,68
P	0,44	0,71	1,46
W	1,75	0,70	0,84
I	1,45	1,37	0,54
M	0,95	1,17	0,91
T	1,34	0,73	1,01

В альфа-спиралях чаще чем в бета-листах или петлях встречаются лейцин, глутамин, глутаминовая кислота и аланин. Мне сложно объяснить это химической природой остатков, например, похожие на глутамин и глутамат аспарагин и аспарат предпочитают петли, а не спирали.

В бета-листах чаще чем в других структурах встречаются тирозин, валин и триптофан. Такую частоту валина и триптофана можно объяснить тем, что они гидрофобны, в то время как в стабилизации структур, содержащих бета-слои обычно играют роль гидрофобные взаимодействия.

В петлях чаще встречались пролин, аспарагин, аспартат и глицин. Появление тут глицина и пролина выглядит закономерно: первый обладает слишком большой гибкостью, чем может дестабилизировать структуры, в то время как второй наоборот имеет слишком жесткую структуру, плохо вписывающуюся в бета-листы и альфа-спирали.