

Практикум 2

Задание 1

В данном практикуме мне были предложены структуры хроматин-связывающего белка BRD4. В задании 1 это **6X7C** и **7JKY**. Посторонние молекулы, помимо самого белка, были удалены. Электронная плотность остова белка показана на Рис.1.

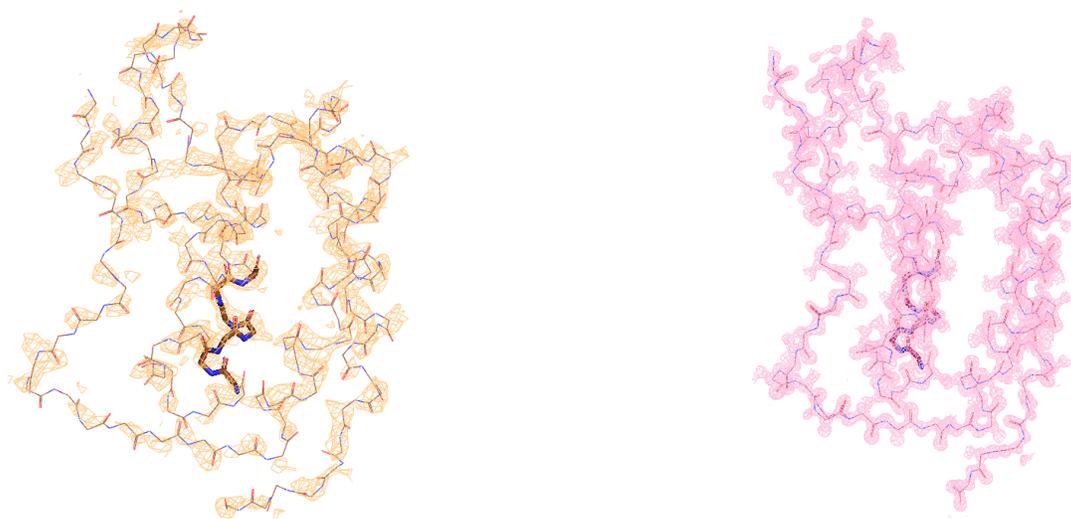


Рис. 1 Электронная плотность всего остова (слева 6X7C, справа 7JKY). Отображение sticks используется для участка α-спирали.

Далее был выбран участок остова Q123-F129, являющийся фрагментом α-спирали для сравнения покрытия электронной плотностью у двух структур. Значение уровня подрезки — 2. Можно предположить, что у структуры 6X7C разрешение ниже.

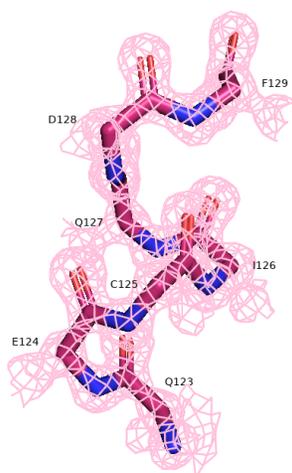


Рис. 2 Электронная плотность остова (7JKY) со 123 по 129 аминокислоту.

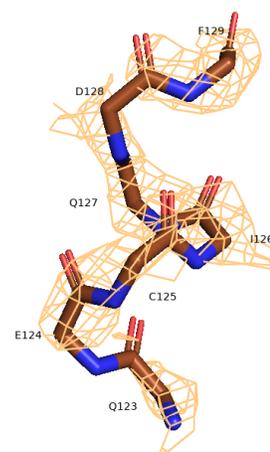


Рис. 3 Электронная плотность остова (6X7C) со 123 по 129 аминокислоту

В случае структуры 7JKY видим, что распределение электронной плотности лучше согласуется с положением атомов, в то время как для другой структуры для некоторых атомов покрытие электронной плотностью не очень хорошее или даже практически отсутствует как на выбранном участке, так и во всей модели (рис.1), т.е. не очень хорошая поддержка структуры электронной плотностью. Как и предполагалось, разрешении структуры 7JKY выше, чем у 6X7C.

Разрешение 6X7C	Разрешение 7JKY
2.70 Å	1.16 Å

Задание 2

В этом задании мне была дана структура **4F2Q** мутантного глутаматного рецептора GluA3 в комплексе с их агонистом (Quisqualate). При увеличении уровня подрезки уменьшается покрытие электронной плотностью, однако оно происходит неравномерно: наиболее сильно разница заметна в концевых участках белка и в петлях на поверхности белка, в то время для

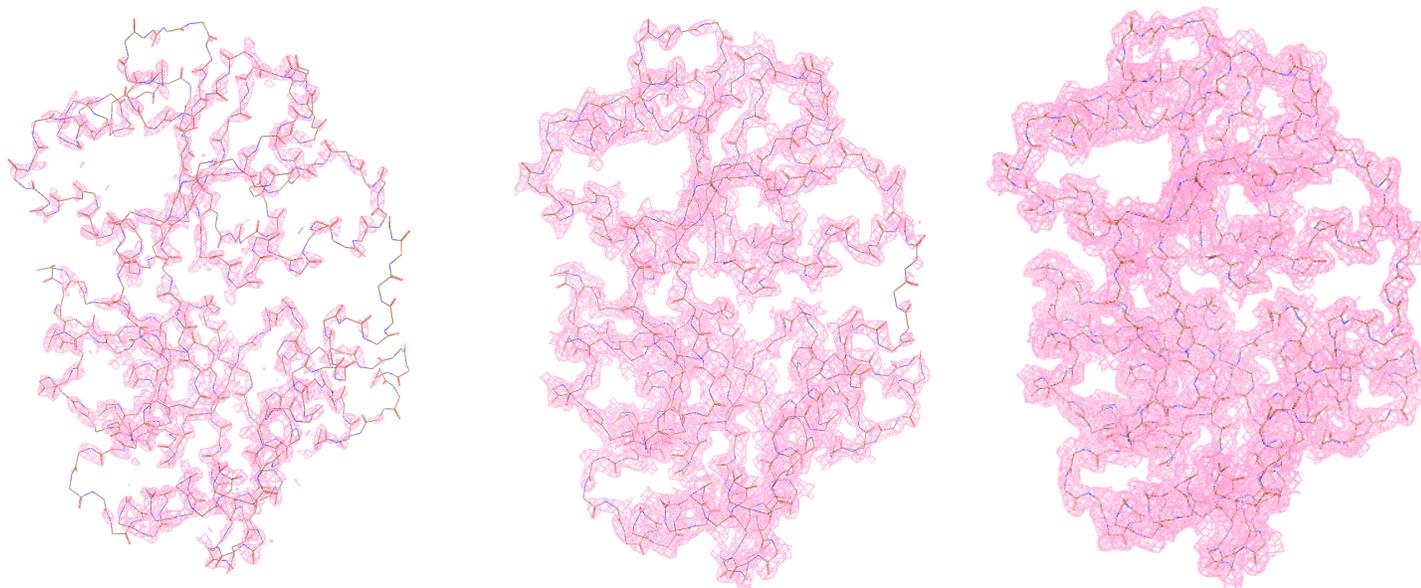


Рис. 3 Электронная плотность остова 4F2Q при уровне подрезки 3 (слева), 2 (в центре), 1 (справа).

участков с регулярной вторичной структурой эти изменения не так заметны. Однако стоит отметить, что в области связывания лиганда также есть менее структурированные участки, но для них разница в покрытии электронной плотностью при увеличении уровня подрезки незначительна.

Задание 3

В этом задании работает с той же структурой, что и в предыдущем задании, но на этот раз рассматривается лиганд и его окружение. Лигандом является низкомолекулярное соединение квискваловая кислота. При изменении уровня подрезки с 1 до 3 электронная плотность в принципе сохраняется для всей структуры, но лучше всего для карбоксильной группы, вероятно, из-за того, что это богатая электронами группа (и, может быть, из-за ее меньшей подвижности – образует солевой мостик с аргинином (расстояние 2.8 Å, показано в PyMOL-сессии).

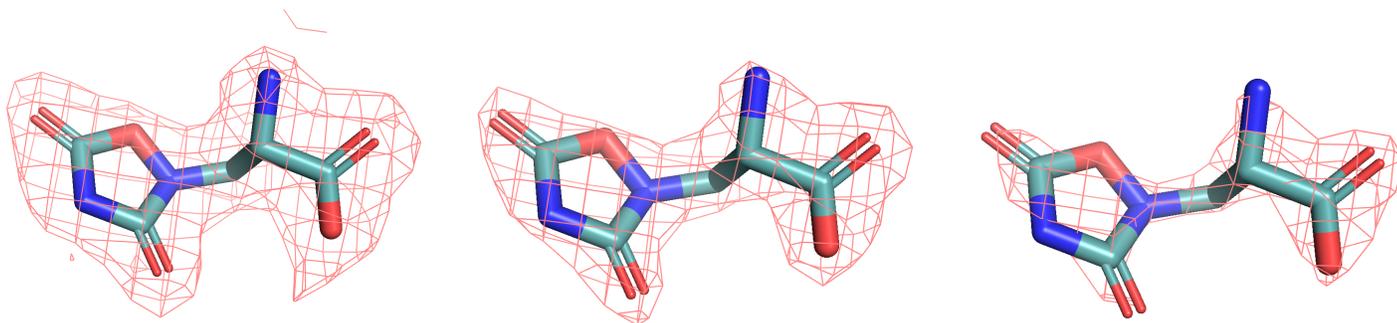


Рис. 4 Электронная плотность лиганда с уровнями подрезки 1 (справа), 2 (в центре), 3 (слева)

PyMOL-сессии можно скачать по ссылкам: [задание 1](#), [задание 2](#), [задание 3](#).