

# Практикум 3

## Задание 1

В данном задании мне была предложена структура бРТЗ, соответствующая лизоциму С, и в ней были рассмотрены пары альтернативных положений (А или В) для ARG<sup>45</sup> и ARG<sup>68</sup>. Можно сделать вывод о том, что одновременно могут существовать оба аргинина в конформациях А или в конформациях В (см. таблицу 1).

Таблица 1. Варианты пар альт-локов для R45 и R68

| Сочетания | R68 (A)  | R68 (B)  |
|-----------|--|--|
| R45 (A)   | Возможно   | Невозможно (перекрытие ван-дер-ваальсовых радиусов) – см.рис.1 |
| R45 (B)   | Невозможно (перекрытие ван-дер-ваальсовых радиусов – см.рис.1) | Возможно   |

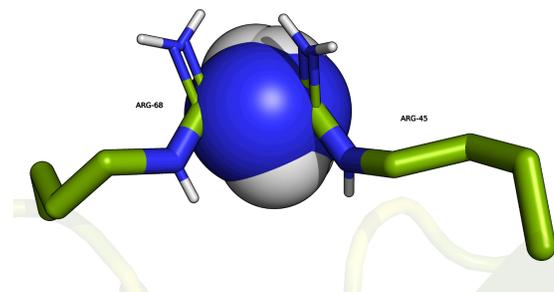


Рис.1 Перекрытие ван-дер-ваальсовых радиусов у двух альтлоков несовместимого типа

Стабилизация аргининов осуществляется за счет образования водородных связей (в т.ч. водяных мостиков). Предполагаемые взаимодействия отмечены на рис. 2. Видим, что ε-азот ARG<sup>68</sup> в обоих конформациях вовлечен в образование водяного мостика. В образование остальных водородных связей вовлечены остатки THR51 и GLY<sup>49</sup>, причем в случае альт-локов (А,А), по-видимому, образуются две водородные связи между ARG<sup>45</sup> и THR51 и одна – между ARG<sup>68</sup> и кислородом остова GLY<sup>49</sup>, в то время как в альтернативном положении (В,В) ситуация на первый взгляд зеркальная. Однако, судя по расстояниям между предполагаемыми донорами и акцепторами водородной связи, можно предположить, что GLY<sup>49</sup> образует водородные связи как с ε и η<sub>1/2</sub>-азотами ARG<sup>68</sup>, так и с водой (показана на Рис.2). Из-за характера пептидной связи (частично двойная) такая ситуация может произойти одновременно, но указанные водородные связи все равно нельзя считать как две полноценные.

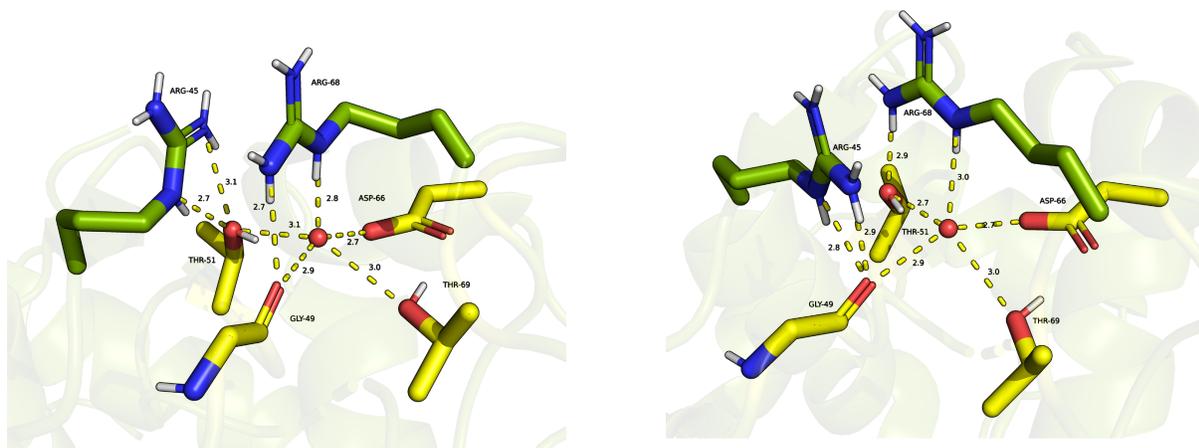
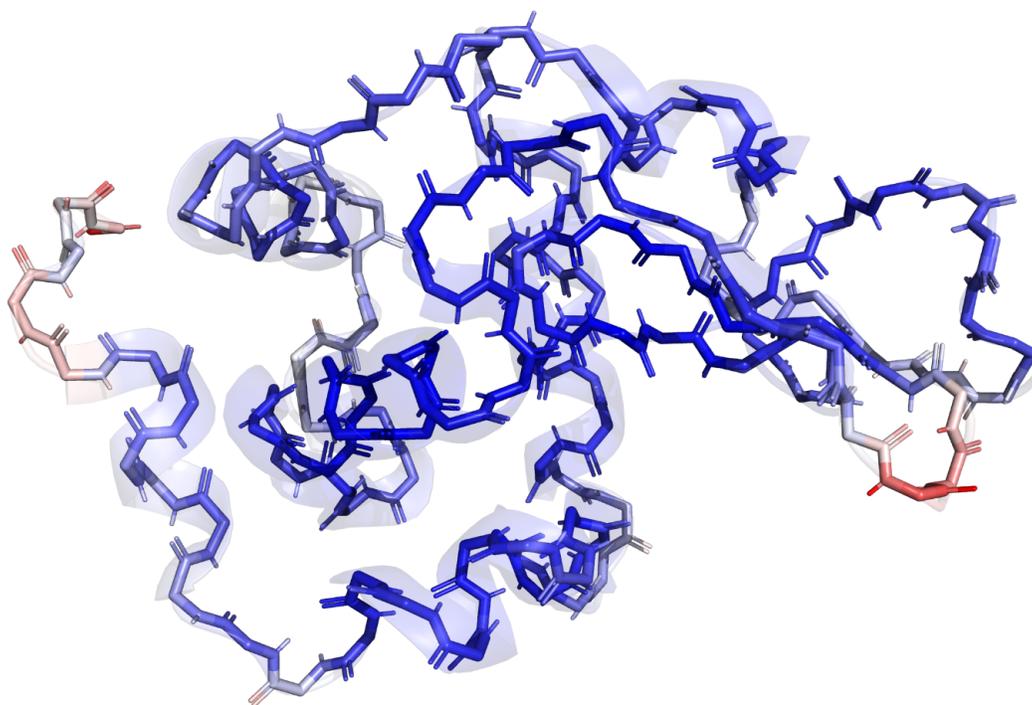


Рис.2 Возможные стабилизирующие взаимодействия для пар конформаций (А,А, слева) и (В,В, справа) 68 и 45 аргининов. Примечание: поскольку у воды предел 4 водородных связи, то все отмеченные связи существуют не одновременно.

Из вышесказанного могу сделать предположение – более стабильной будет пара альтернативных положений (А,А) для двух аргининов, но различие вряд ли будет значительным. Это в какой-то степени подтверждается значениями осцирапсу: 0.59 для указанной пары против 0.41 для альтернативной.

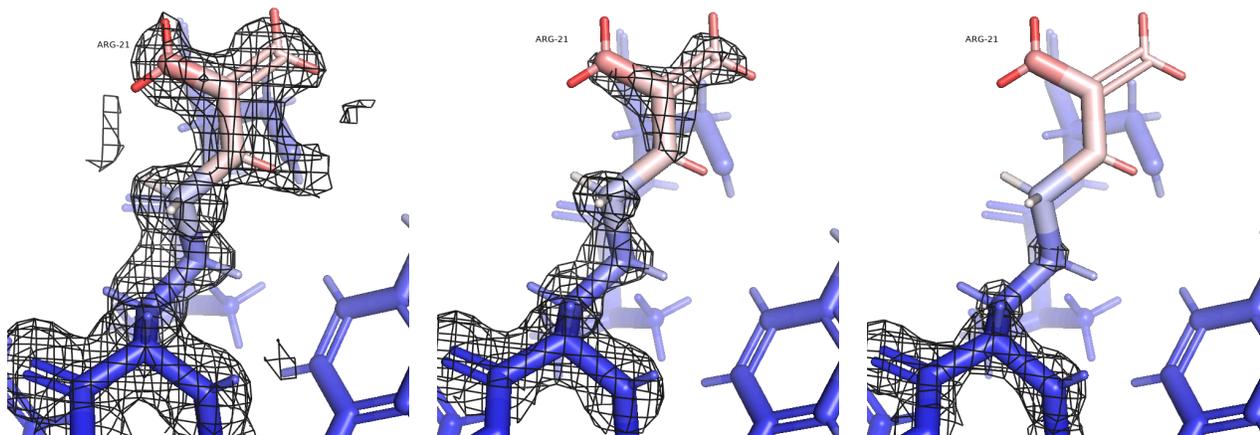
## Задание 2

В-фактор (температурный фактор) описывает степень отклонения атома от его среднего положения. При окраске остова белка, использовавшегося в задании 1, согласно значениям В-факторов, видим на рис.3, что части остова, расположенные на периферии, имеют большие значения В-фактора, причем это верно как для участков с регулярной вторичной структурой (хотя отличия менее значительны), так и без нее. Такой результат ожидаем, так как для наружных участков белка характерна большая подвижность.



**Рис.3** Остов лизоцима (6RT3) в отображении sticks и окраске по В-факторам. Также добавлено отображение cartoon для показа участков с регулярной вторичной структурой (синий соответствует низким значениям В-фактора, красный – высоким)

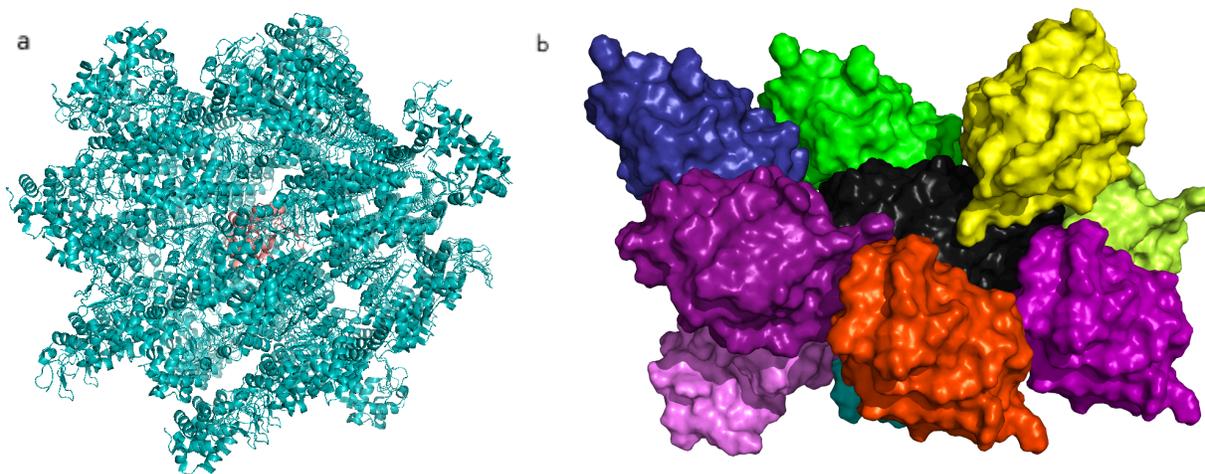
Далее был выбран ARG<sub>21</sub>, находящийся на поверхности белка. Значения В-фактора в нем увеличиваются по мере продвижения от C $\alpha$ -атома к гуанидиновой группе. Покрывание электронной плотностью при увеличении уровня подрезки уменьшается в первую очередь на атомах с большими значениями В-фактора (проиллюстрировано на рис. 4), так как более подвижные атомы распределены по большему объему и соответствующая им электронная плотность ниже, чем у слабо подвижных атомов.



**Рис.4** Электронная плотность ARG<sup>21</sup>, окраска по B-фактору, уровни подрезки (слева направо): 0.5, 1, 2, carve=1-1.5

### Задание 3

В данном задании рассматривалась кристаллическая решетка все того же белка. На рис.5а приведен восстановленный фрагмент кристалла на расстоянии 50 Å от отображаемой в PyMOL структуры. Можно хорошо увидеть периодичность кристаллической решетки. На рис.5b изображена исходная структура и непосредственно контактирующие с ней соседи в кристалле. Был установлен порог на расстояние – 5 Å, однако непосредственный контакт с исходной структурой наблюдался среди 9 из 16 отображенных структур.



**Рис.5 (а)** Фрагмент восстановленного кристалла, персиковым цветом показана исходная структура **(b)** Исходная структура (обозначена черным цветом) и ее соседи по кристаллу, с которыми она находится в непосредственном контакте.

Ссылки на PyMOL-сессии: к заданию [1](#), [2](#), [3](#).