

Задание 1.

В данном задании было необходимо проанализировать взаимодействия антитела 48G7 с его лигандом, который представляет из себя 5-(пара-нитрофенилфосфат)-пентановая кислота (Рис. 1.)

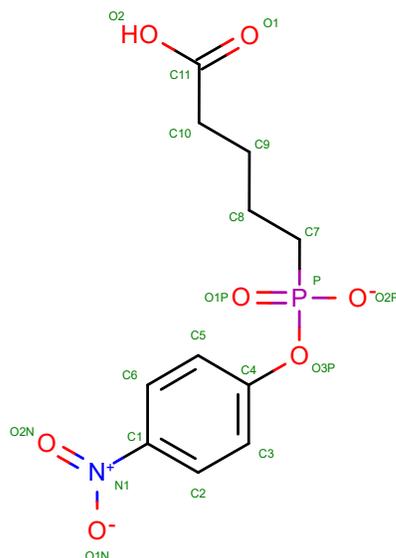


Рис. 1. Структурная формула лиганда

Для выполнения задания было решено сначала проверить взаимодействия лиганда с антителом, которые указаны в PDB. Затем в PyMol была загружена структура и выбран лиганд с его окружением. Для начала было решено проверить, все ли контакты программа найдет автоматически. К сожалению, open-source версия не поддерживает нахождение стэкинг-взаимодействий. Также не удалось автоматически найти все полярные взаимодействия, так как водород Тирозина-94 был ориентирован иначе, поэтому программа не смогла определить данное взаимодействие.

После сравнения всех взаимодействий, которые указаны в базе данных и тех, которые были найдены программой, были построены несколько взаимодействий вручную. В итоге получилось 4 водородных связи и одно стэкинг-взаимодействие, а также один солевой мостик от нитрогруппы до гистидина (Рис. 2.).

[Ссылка на PyMol-сессию](#)

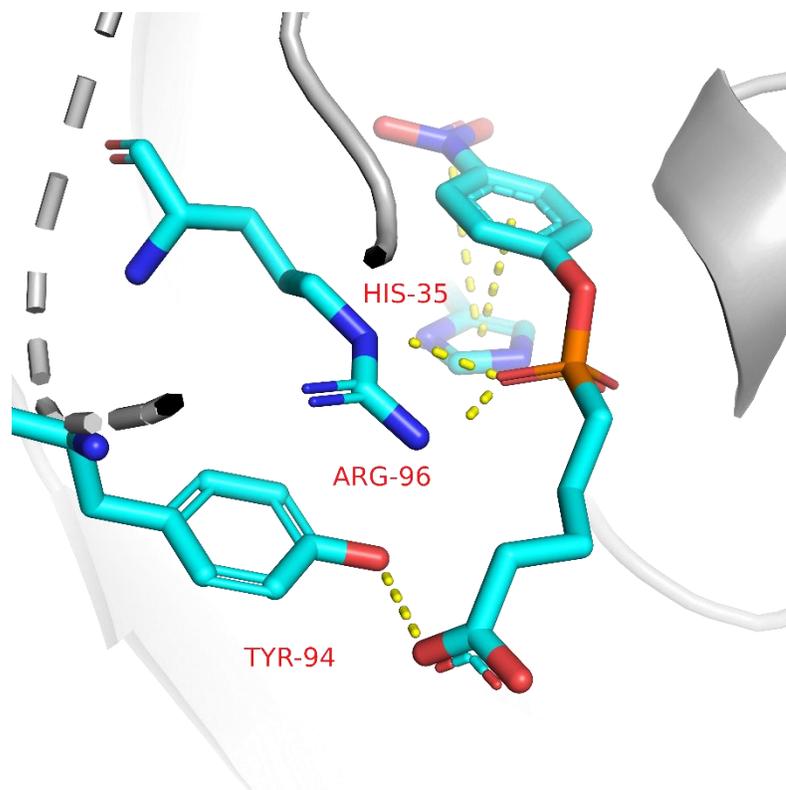


Рис. 2. Взаимодействие лиганда с аминокислотными остатками антитела 48G7

Задание 2.

В данном задании нужно было определить, какая аминокислота была заменена на глицин в указанной позиции. Для этого сначала было решено визуализировать данную аминокислоту и ее окружение. Поскольку нам неважно взаимодействие внутри цепи с данной аминокислотой, то эти аминокислоты не будем включать в окружение. Также для большей наглядности на изображениях не будем показывать остальные части антитела (Рис. 3.).

Затем отобрал полярные аминокислоты и заряженные аминокислоты, так как именно они могут потенциально взаимодействовать с данным окружением. После этого был написан скрипт, который перебирает все эти аминокислоты и все возможные ротамеры. Из этих изображений вручную отобрал допустимые замены. В итоге было решено оставить замены на аспарат (Рис. 4.) и аспарагин (Рис. 5.). Однако если учесть наличие солевого мостика с аспаратом, то он более вероятен, как исходная аминокислота.

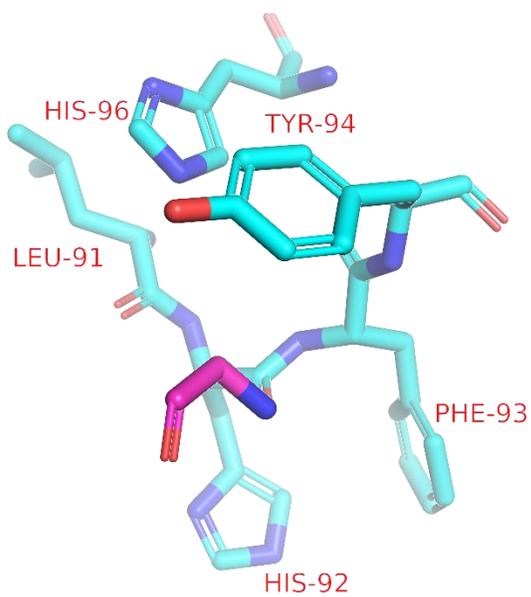


Рис. 3. Глицин и его окружение, с которым могла взаимодействовать исходная аминокислота

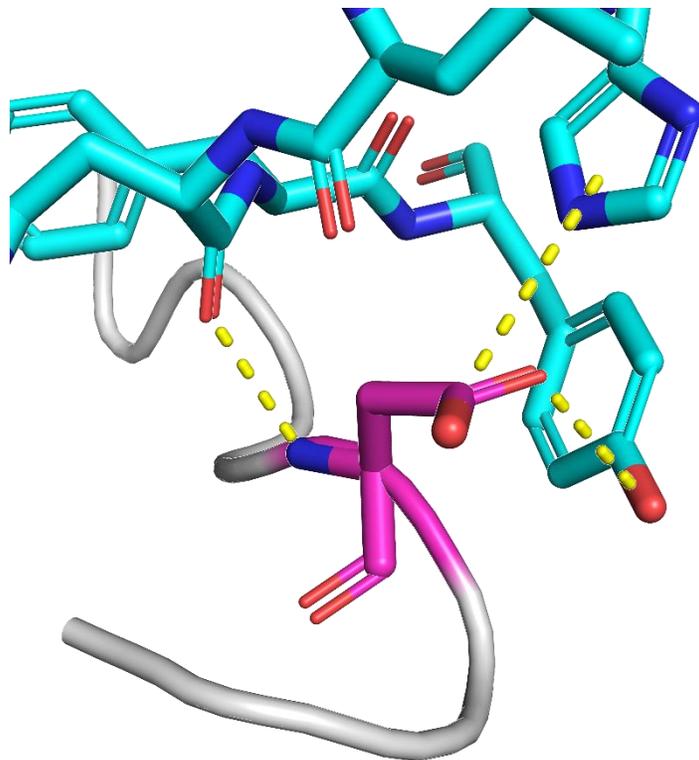


Рис. 4. Аспаргат и его взаимодействия с антителом

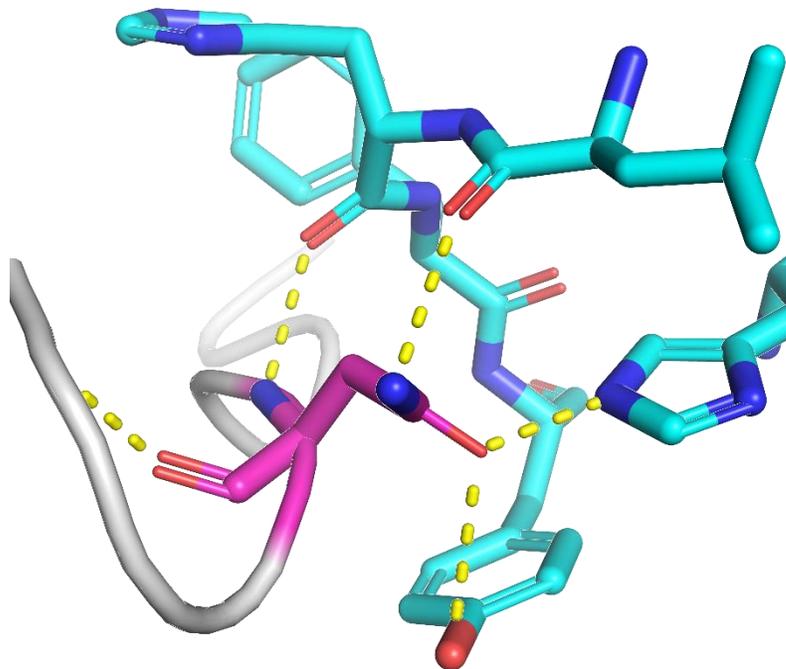


Рис. 5. Аспарагин и его взаимодействия с антителом

[Ссылка на исходную PyMol-сессию](#)

[Ссылка на PyMol-сессию с аспаратом](#)

[Ссылка на PyMol-сессию с аспарагином](#)

[Ссылка на скрипт, упомянутый в тексте](#)