

## Задание 1

В данном задании необходимо провести протонирование белка при помощи алгоритма PROPKA и самостоятельно оценить результат. Для этого сначала изучим запись о выданном белке, а именно о 5KHN. В PDB указано, что данная структура была получена при pH равном 3.5. Зададим именно это значение во входных данных для алгоритма. Также в опциях программы укажем, чтобы в итоговом файле цепи назывались аналогично тому, как они называются в исходной структуре. Это необходимо, поскольку в структуре 2 цепи, а значит, нам важно знать имя цепи для визуализации протонированных аминокислот и их окружения.

В результате работы алгоритма PROPKA получаем два файла: log-файл, в котором можно найти таблицу с pKa протонированных аминокислот, и rqr-файл, содержащий модель протонированного белка. Из первого файла найдем аспартат, глутамат и гистидин, которые имеют наибольшее значение pKa: ASP344A (9.19), GLU761B (10.03) и HIS90A (9.87). Визуализируем эти аминокислоты и их окружение. С фактом протонирования аспартата можно согласиться, так как в таком случае образуется водородная связь, однако расположение водорода не совсем благоприятно для водородной связи (Рис. 1). С фактом протонирования глутамата соглашаемся, так как образуется водородная связь, также расположение водорода благоприятно для этой связи (Рис. 2). С фактом протонирования гистидина тоже соглашаемся, так как в таком случае могут быть образованы солевые мостики, однако протонирование двух глутаматов в окружении гистидина все портит (Рис. 3).

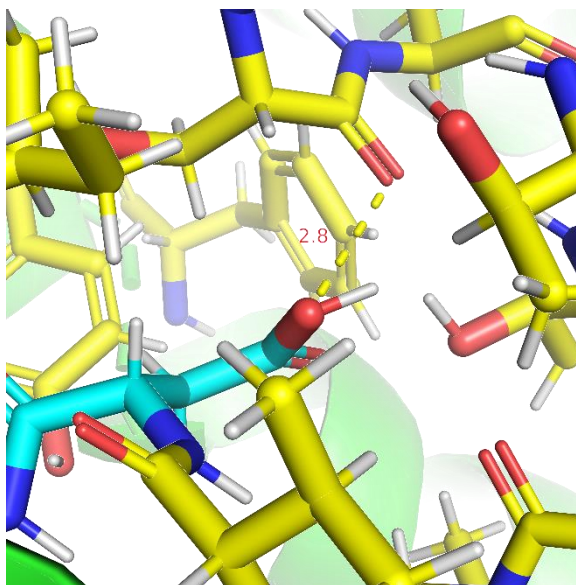
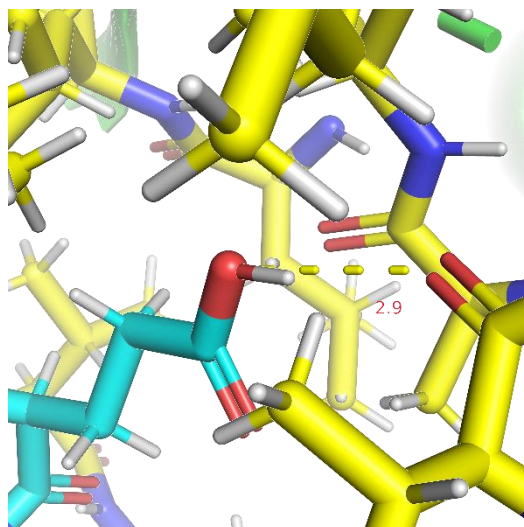
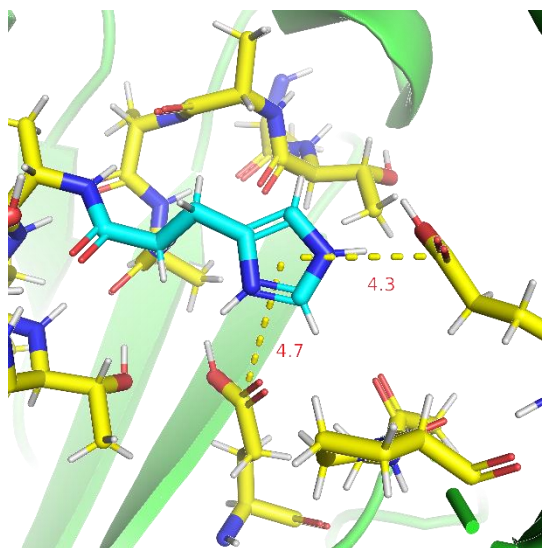


Рис. 1. Окружение протонированного аспартата



**Рис. 2.** Окружение протонированного глутамата



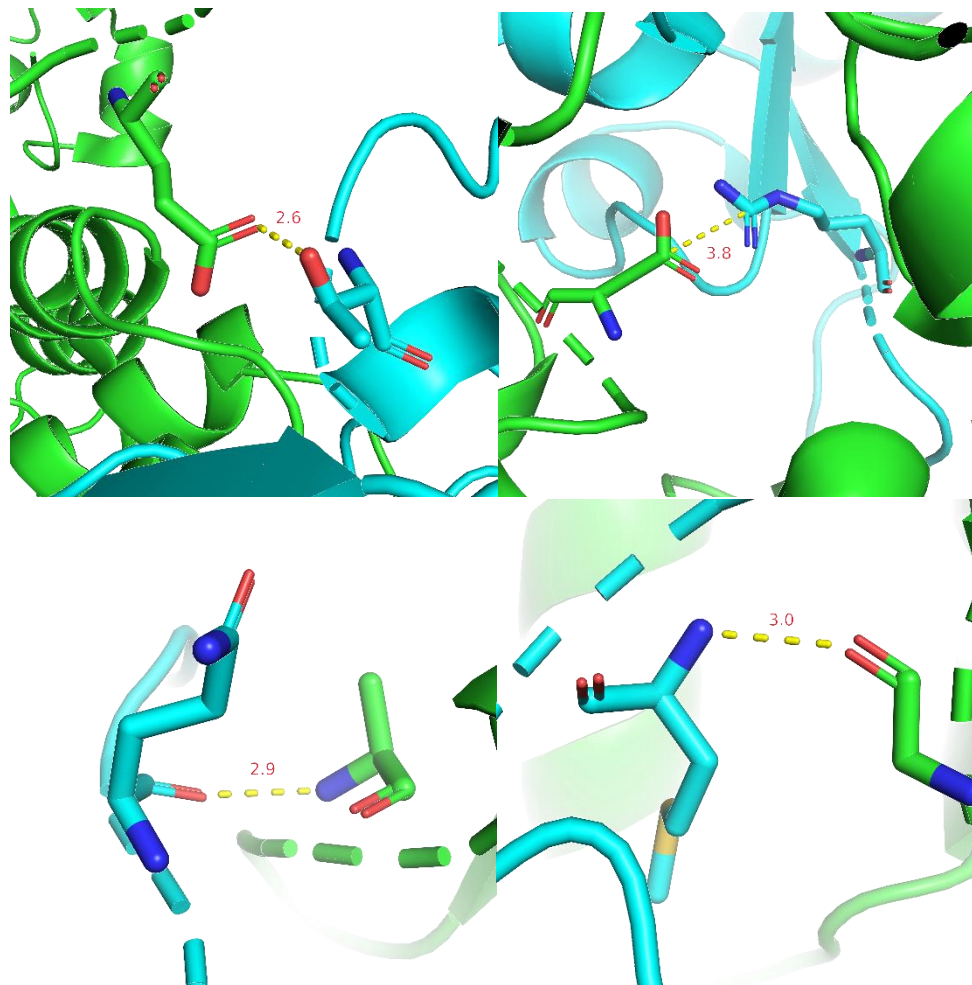
**Рис. 3.** Окружение протонированного гистидина

## Задание 2

В данном задании необходимо определить контакты между мономерами белкового филамента. Для этого изучим филамент в целом, загрузив в PyMol структуру 6BNO. Как стало понятно из рассмотрения структуры и записи в PDB, данный филамент является октомером. Однако стоит заметить, что цепи расположены не очень близко друг к другу, поэтому не можем ожидать большого числа хороших контактов.

Далее будем работать с цепью А и, используя заготовку в Jupiter-notebook, определим конкретные места контактов. Из полученной при работе скриптов таблицы выберем взаимодействия только с цепью А, а также сразу ограничим длину контакта 4 Ангстремами. В результате получилось 4 полярных контакта

(один из которых является солевым мостиком), несколько слабых полярных контактов и остальные контакты, являющиеся “возможными” взаимодействиями. Стоит отметить, что примерно такой картины мы и ожидали, исходя из расположения цепей в филаменте. Визуализируем эти контакты (Рис. 4). Заметим, что данные взаимодействия предсказались достаточно хорошо.



**Рис. 4.** Контакты цепи А (цианового цвета) с соседними цепями

[Ссылка на PyMol-сессию с протонированным белком](#)

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

[Ссылка на log-файл протонирования](#)

[Ссылка на json-файл контактов филамента](#)