

Задание 1

В данном задании требовалось сравнить две структуры митохондриального активатора убиквитин лигазы: структуры, полученной методом РСА, и структуры, полученной методом ЯМР. Для этого загрузим в PyMol структуры 6K2K и 6M2C. Заметим, что в структуре рентгеноструктурного анализа находится 8 цепей, из которых только 4 соответствуют нашей белковой молекуле.

Выберем 3 различные водородные связи: первую – между атомами остова во вторичной структуре (Рис. 1), вторую – между атомами остова петли (Рис. 2) и третью – между атомами боковой цепи (Рис. 3). Главная сложность выбора заключается в том, что в выданной молекуле всего 50 аминокислот, поэтому сложно было найти водородную связь между атомами боковой цепи.

Найдем те же самые связи в ЯМР-структуре и заполним таблицу, опираясь на параметры моделей (Табл. 1).

Таблица 1. Сравнение водородных связей в РСА-структуре и ЯМР-структуре

Расстояние в РСА-структуре, Å	Количество моделей ЯМР, в которых наблюдается связь	Минимальное расстояние связи в ЯМР-структуре, Å	Максимальное расстояние связи в ЯМР-структуре, Å	Медиана, Å
3.0	20/20	2.8	3.0	2.9
2.7	20/20	2.7	2.9	2.8
3.1	2/20	3.6	6.0	4.6

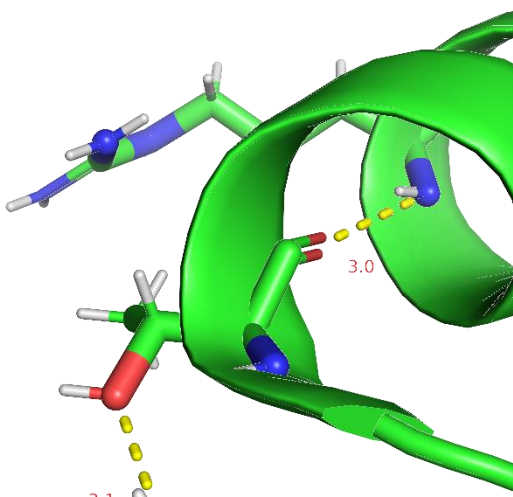


Рис. 1. Водородная связь в альфа-спирали

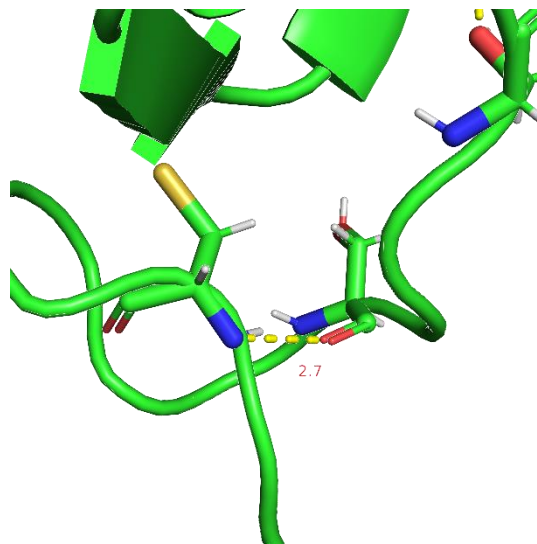


Рис. 2. Водородная связь в петле

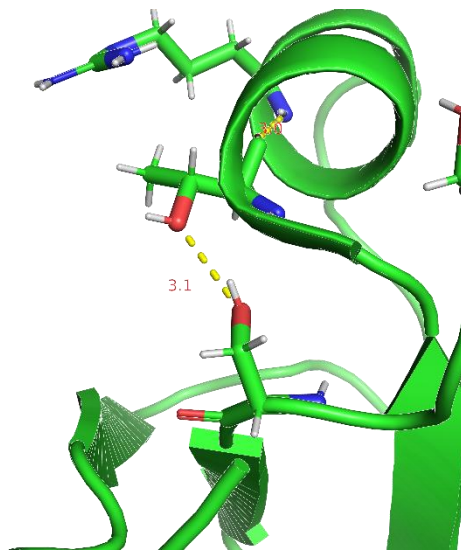


Рис. 3. Водородная связь между атомами боковой цепи

Задание 2

В данном задании необходимо рассмотреть взаимосвязь двух показателей для аминокислот: B-фактора и RMSF. Для этого будем работать с ЯМР-структурой, PCA-структурой и библиотекой ProDy. Создадим таблицу со значениями B-фактора и RMSF каждой из аминокислот, а затем построим график зависимости одного параметра от другого. Были построены два графика: по всем аминокислот (Рис. 4) и без крайних аминокислот, которые являются наиболее подвижными (Рис. 5). Ожидалось, что будет наблюдаться прямая пропорциональность, но судя по линеаризации, мы видим обратную пропорцию. Такое неочевидное наблюдение может быть связано с тем, что у нас в

распоряжении очень мало данных (50 аминокислот для одного графика и 46 для другого).

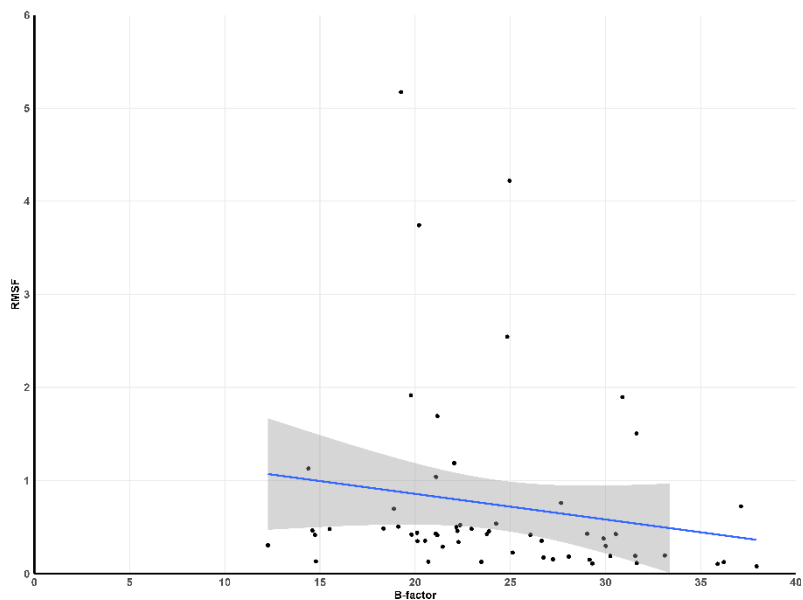


Рис. 4. Взаимосвязь RMSF и B-фактора для всех аминокислот

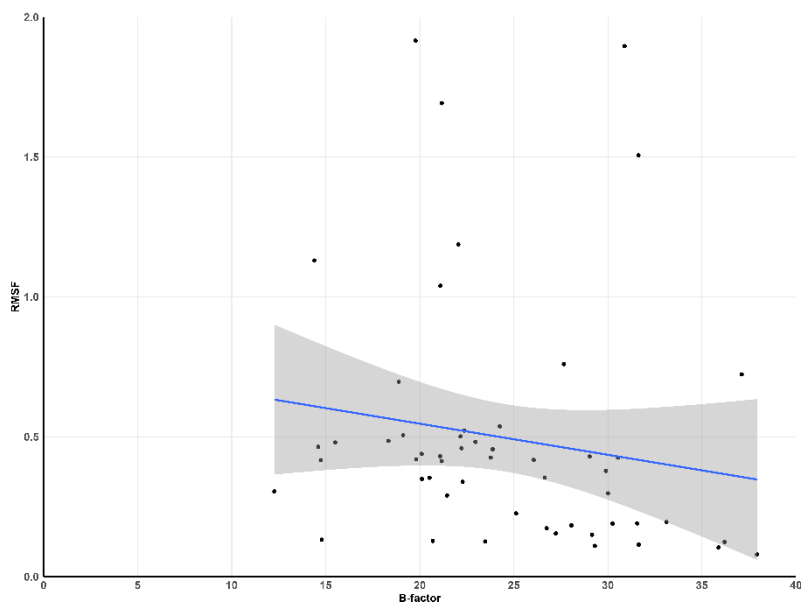


Рис. 5. Взаимосвязь RMSF и B-фактора за исключением краевых аминокислот

Задание 3

Далее предлагается сравнить гипотезу из статьи о том, что B-фактор и RMSF связаны следующей формулой:

$$RMSF^2 = \frac{3 * B}{8 * \pi^2}$$

Для анализа данной гипотезы получим значения RMSF и B-фактора для каждого атома белковой молекулы и преобразуем их в соответствии с формулой. Затем построим два графика: для всех аминокислот (Рис. 6) и с исключением краевых аминокислот (Рис. 7). Ожидалось увидеть прямую пропорциональность, но мы видим еще меньшую зависимость в сравнении с предыдущим заданием. Данное наблюдение ставит под сомнение формулу или же качество анализируемых структур, так как при составлении таблиц вводились специальные индексы, чтобы было полное соответствие данных.

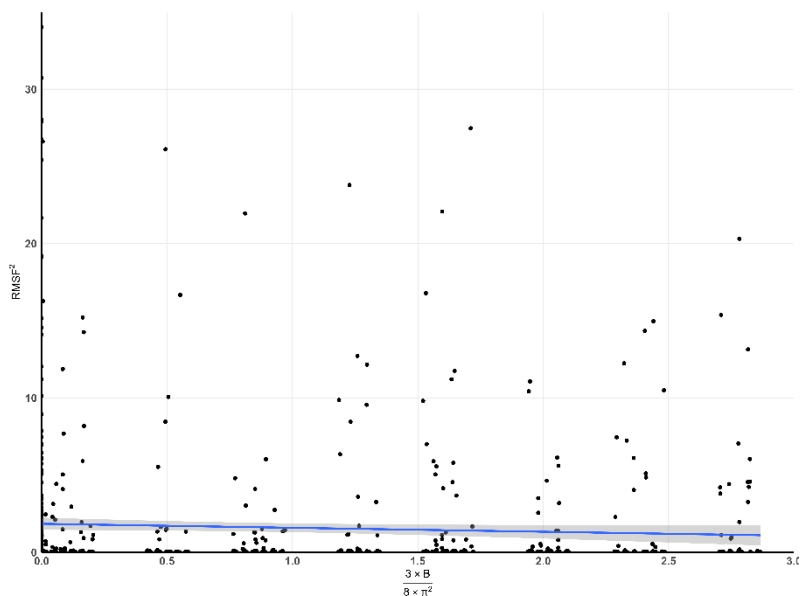


Рис. 6. Взаимосвязь преобразованных RMSF и B-фактора для всех аминокислот

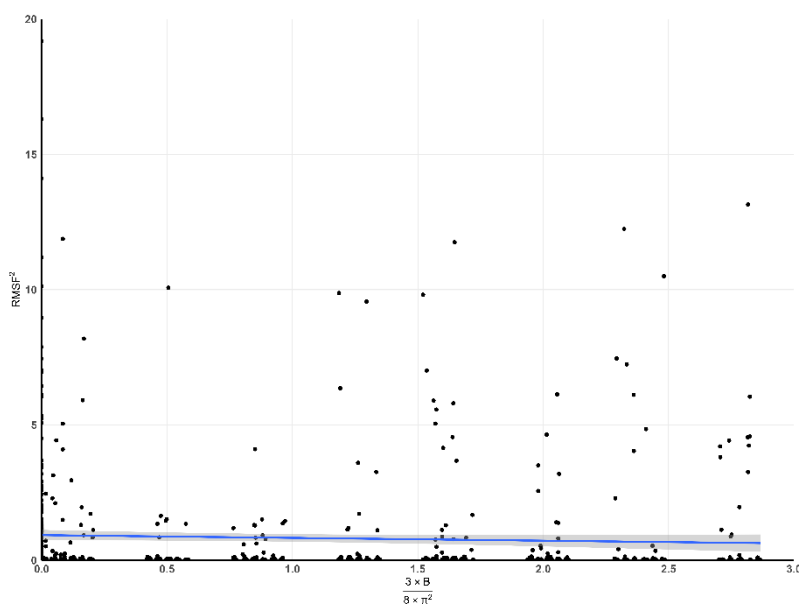


Рис. 5. Взаимосвязь преобразованных RMSF и B-фактора за исключением краевых аминокислот

[Ссылка на PyMol-сессию с измеренными расстояниями в PCA-структуре](#)

[Ссылка на PyMol-сессию с измеренными расстояниями в ЯСР-структуре](#)

[Ссылка на таблицу с средними значениями В-фактора и RMSF для всех аминокислот](#)

[Ссылка на таблицу с средними значениями В-фактора и RMSF без краевых аминокислот](#)

[Ссылка на таблицу с преобразованными значениями В-фактора и RMSF для всех аминокислот](#)

[Ссылка на таблицу с преобразованными значениями В-фактора и RMSF без краевых аминокислот](#)

[Ссылка на скрипт для второго задания](#)

[Ссылка на скрипт для третьего задания](#)