

Практикум 2

Ссылки на сессии:

<https://kodomo.fbb.msu.ru/~kmd/term7/pr2.pse>

https://kodomo.fbb.msu.ru/~kmd/term7/pr2_2.pse

https://kodomo.fbb.msu.ru/~kmd/term7/pr2_3.pse

Задание 1.

В первом задании предлагалось сравнить две структуры одного белка: 5YOK и 1FQX. Сперва они обе были визуализированы и выровнены по структурам для поиска различий. На рисунке 1 видно, что участок бета-слоя одной структуры не совпадает с тем же участком другой структуры, на котором участки бета-слоя прерываются неструктурированной последовательностью.

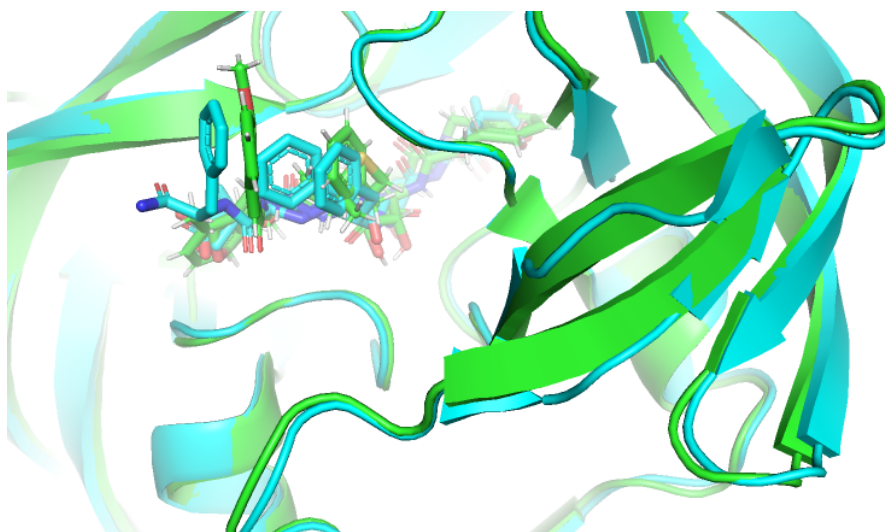


Рис. 1. Выравнивание двух структур относительно друг друга. Видны различия в структуре одного из бета-листов.

Далее была выбрана небольшая альфа-спираль с 86 по 91 остаток А цепи и визуализирована ее электронная плотность в каждой структуре.

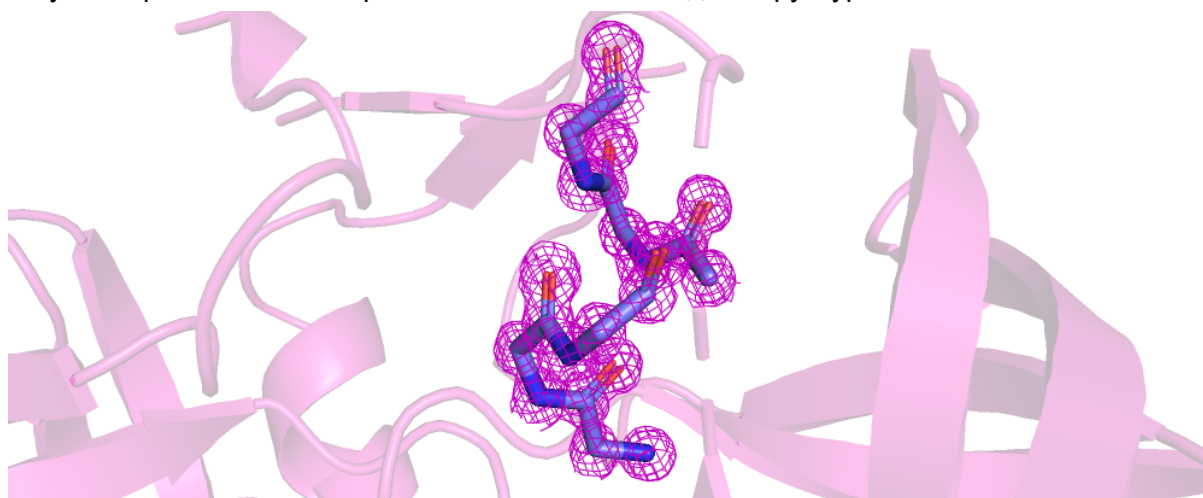


Рис. 2. Электронная плотность альфа-спирали с 86 по 91 аминокислотный остаток в структуре 5YOK.

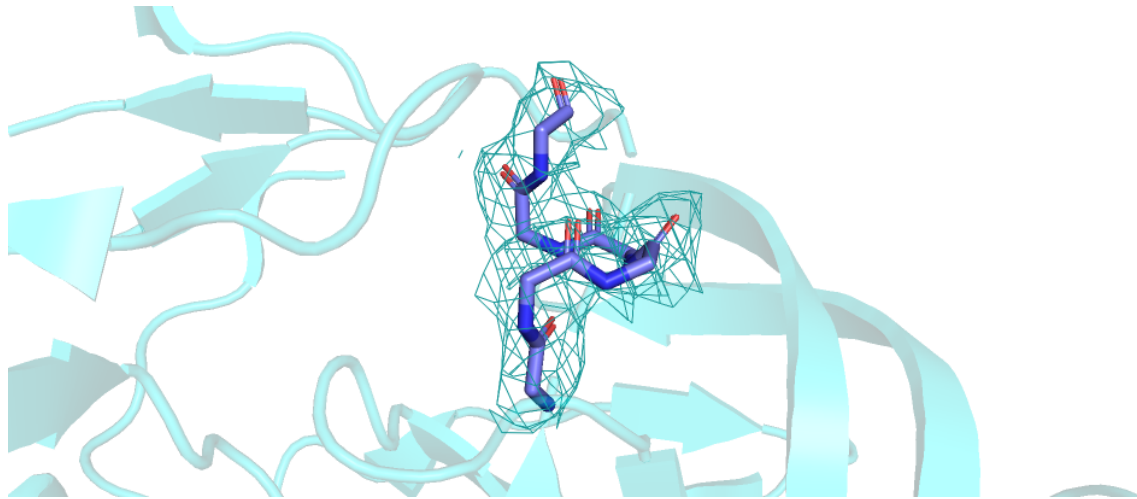


Рис. 3. Электронная плотность альфа-спирали с 86 по 91 аминокислотный остаток в структуре 1FQX.

Из рисунков видно, что разрешение структуры 5YOK выше чем структуры 1FQX, т. к. электронная плотность 5YOK показывает расположение отдельных атомов в виде сфер, также размер сфер для разных атомов отличается, он больше у более электроотрицательных атомов. Электронная плотность 1FQX равномерно распределена вдоль всей альфа-спирали, и мы не видим ее разделение на сферы электронной плотности для отдельных атомов. Из PDB разрешение 5YOK составляет 0.85 \AA , а разрешение 1FQX – 3.10 \AA . Эти данные подтверждают выводы, сделанные на основе визуализации.

Задание 2.

Следующей структурой PDB является 4NWC. На нижеприведенных рисунках представлен остов белка с подрезкой на уровнях 1, 2 и 3. Первыми покрытие электронной плотности при увеличении уровня подрезки теряют участки, наиболее удаленные от центра, а также не представленные структурой альфа-спирали или бета-слоя. Это может быть связано с тем, что данные структуры более подвижны, поэтому электронная плотность в этой области снижена. Затем начинает терять электронную плотность скопление альфа-спиралей, представленных в нижней части рисунка. Это может быть связано с тем, что скопление альфа-спиралей в верхней части рисунка является более плотным.

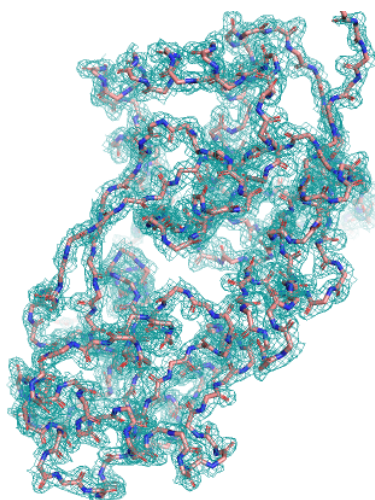


Рис. 3. Электронная плотность вокруг структуры 4NWC с уровнем подрезки 1.

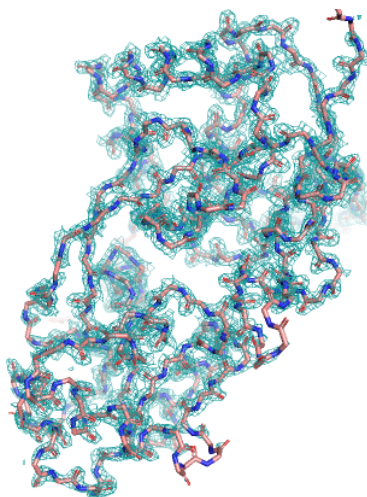


Рис. 4. Электронная плотность вокруг структуры 4NWC с уровнем подрезки 2.

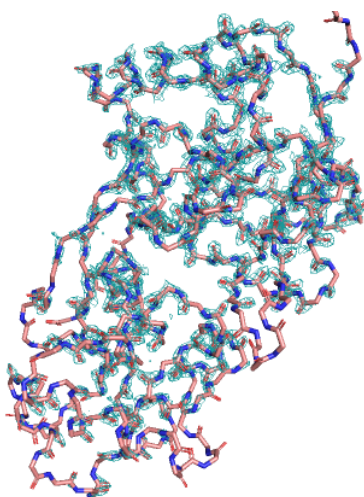


Рис. 5. Электронная плотность вокруг структуры 4NWC с уровнем подрезки 3.

Задание 3.

На структуре 4NWC была визуализирована электронная плотность вокруг лиганда на уровнях подрезки 1, 2, 3. Сильнее всего электронная плотность была выражена вокруг электроотрицательных атомов, таких как азот и кислород.

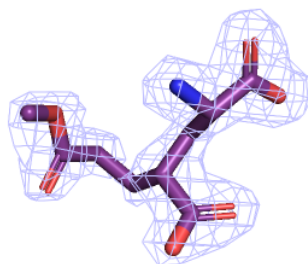


Рис. 6. Электронная плотность вокруг лиганда на уровне подрезки 1.

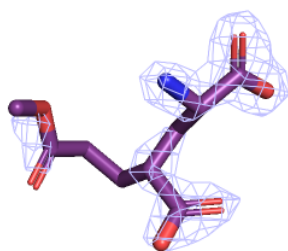


Рис. 6. Электронная плотность вокруг лиганда на уровне подрезки 2.

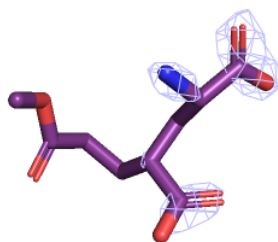


Рис. 6. Электронная плотность вокруг лиганда на уровне подрезки 3.