

## Восстановление кристалла из PDB файла

### Кристаллографические характеристики

89.700 89.700 127.700 90.00 90.00 120.00 P 32 2 1 6 (Поле CRYST1)

Длины направляющих векторов:

$a = 89.70$

$b = 89.70$

$c = 127.70$

Углы между направляющими векторами кристалла:

$\alpha = 90.00$

$\beta = 90.00$

$\gamma = 120.00$

Кристаллографическая группа P 32 2 1

Число молекул в ячейке 6

### Взаимодействия с белками из соседних ячеек

На рисунке 1 представлено содержимое кристаллических ячеек структуры 1B9H белка АНВА синтаза из *Amycolatopsis mediterranei*. В каждой ячейке содержится три димера, то есть 6 молекул белка, причём видно, что одну и ту же кристаллическую ячейку можно определить в двух разных плоскостях.

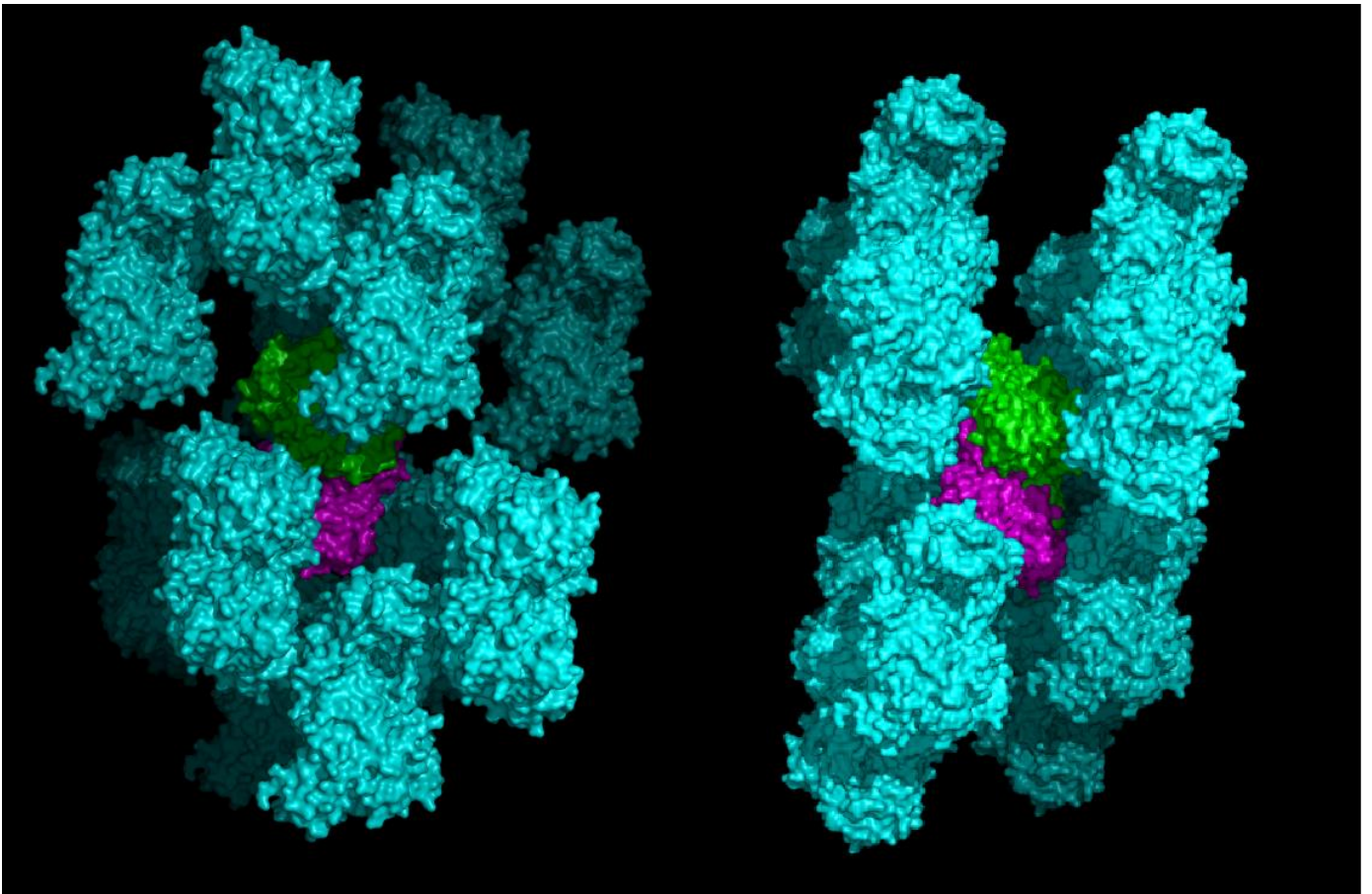


Рис. 1. Содержимое ячеек кристалла 1V9H. Зелёным и фиолетовым показаны 2 субъединицы АНВА синтазы

### **Анализ внутрикристаллических контактов**

Димеры АНВА синтазы взаимодействуют между собой одинаково как внутри кристаллических ячеек, так и между ними (Рис. 1). Это говорит о том, что взаимодействия между димерами в кристалле не биологические, то есть в организме их нет. Поэтому взаимодействие между двумя димерами только одного типа (Рис. 2).

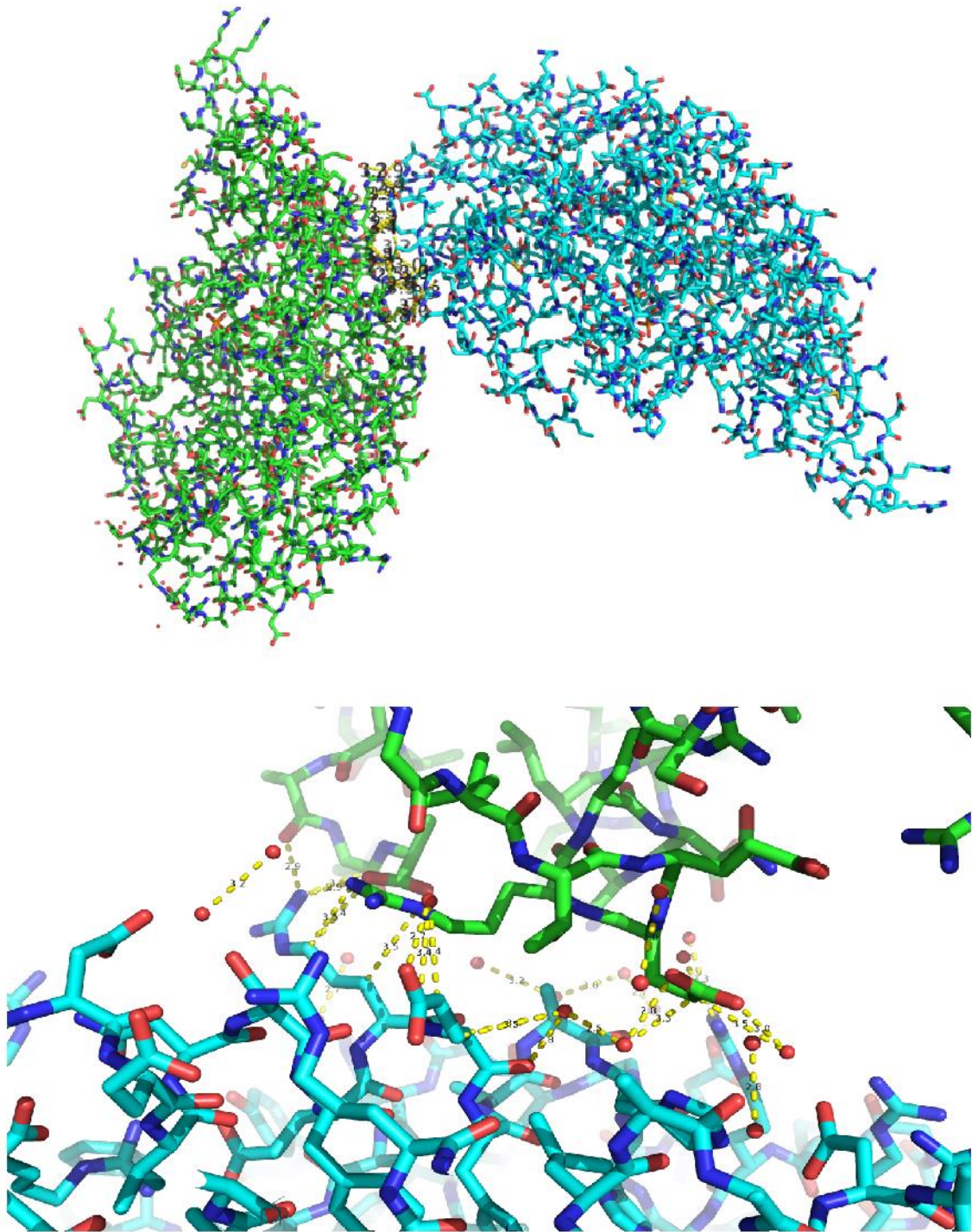


Рис. 2. Взаимодействие субъединиц разных димеров АНВА синтазы в кристалле

### **Структура ДНК-белкового комплекса 3HDD**

Модель 3HDD описывает структуру комплекса гомеодомена *D. melanogaster* с ДНК. Положение одной из молекул белка, связанной с концом цепи ДНК, выглядит подозрительным (Рис. 3).



Рис. 3. Структура 3HDD

При достройке соседней ячейки становится видно, что молекула белка, находящаяся в подозрительном положении, на самом деле связывается с двумя молекулами ДНК в кристалле (Рис. 4).

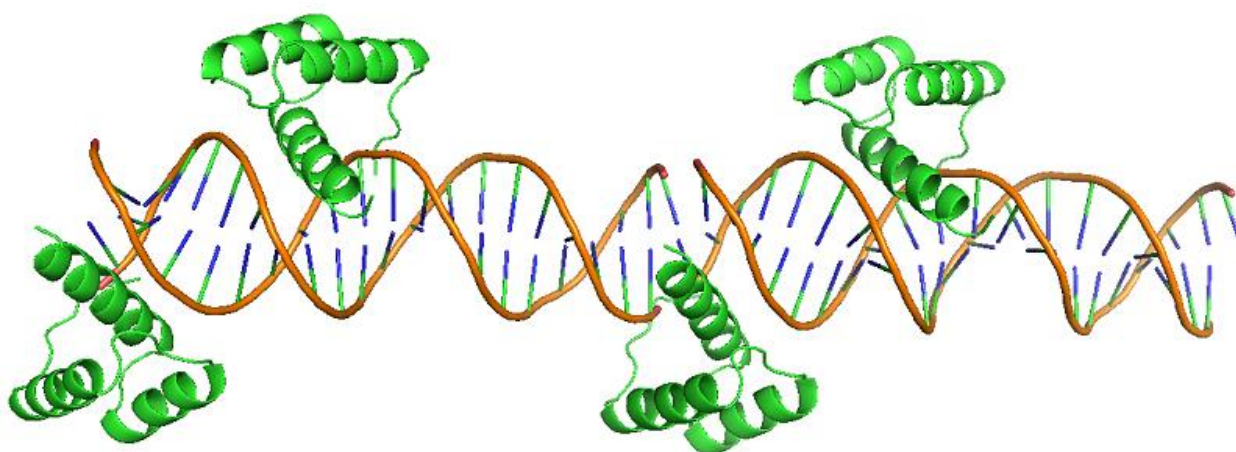


Рис. 4. Структура 3HDD в достроенном кристалле

### Асимметрическая единица не совпадает с биологической

Многие белки состоят из нескольких одинаковых субъединиц, поэтому часто асимметрическая единица, соответствующая одной субъединице белка, меньше биологической (Рис. 5)

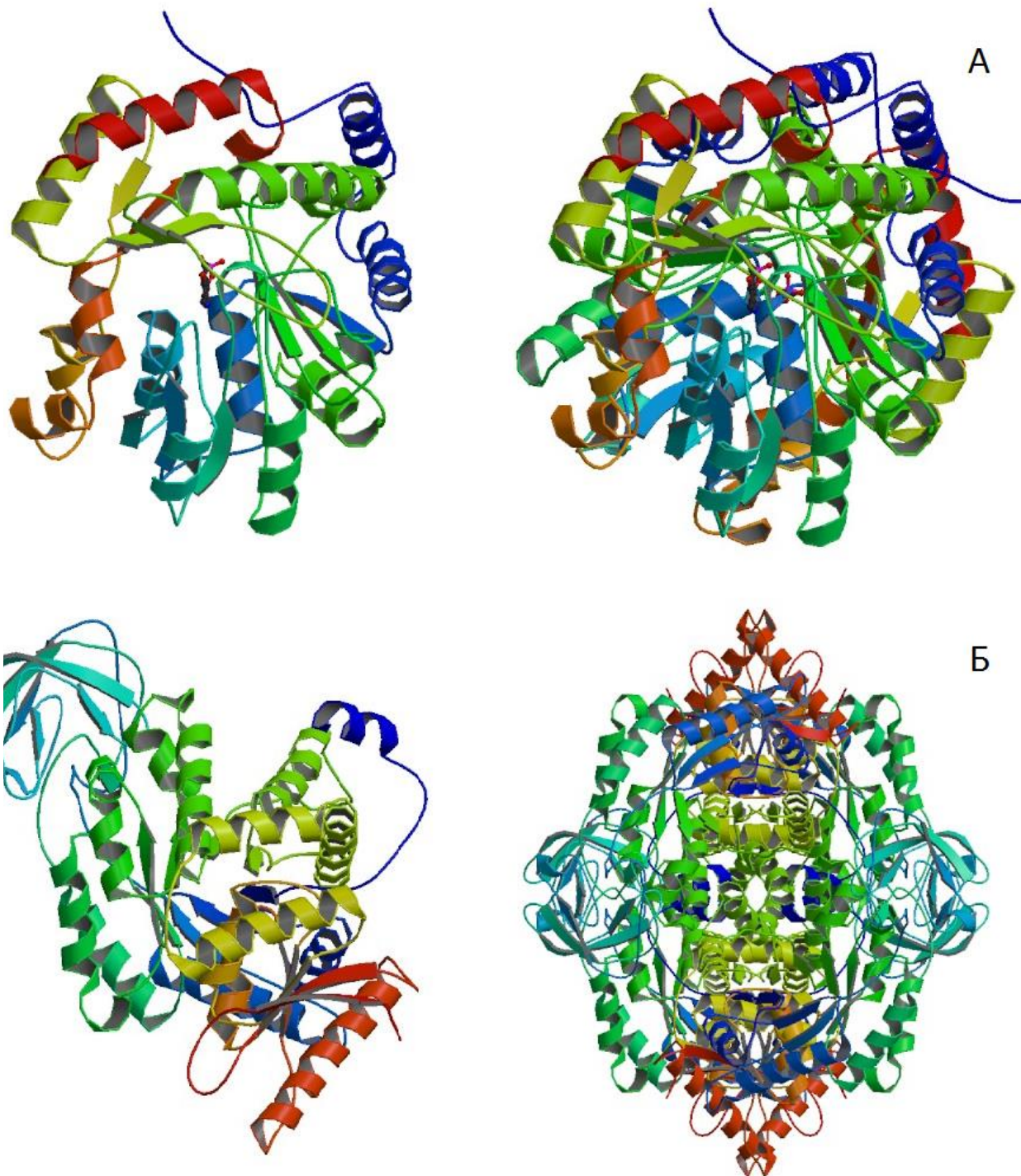


Рис. 5. Асимметрическая и биологические единицы: (А) АНВА синтаза (PDB 1B9H) и (Б) пируваткиназа М2 человека (PDB 1ZJH)