

Интерпретация ЯМР структуры

Для работы был выбран белок пролил-цис-трансизомераза *Homo sapiens*. Белок представляет собой гомодимер, длина белковой цепи которого составляет 163 аминокислотных остатка. Его структура получена методами РСА и ЯМР. Будем рассматривать здесь структуру мономера.

Параметры структуры РСА:

- Идентификатор PDB 1PIN
- Разрешение 1,35 Å

Параметры структуры ЯМР:

- Идентификатор PDB 1NMV
- 10 моделей

На рисунке 1 представлено совмещение структур РСА и ЯМР, построенное с помощью программы [LCore](#) со стандартными параметрами. В белке есть неподвижная часть, где вторичные структуры соотносятся очень хорошо, и подвижная часть, которая содержит 3 антипараллельных бета-слоя.

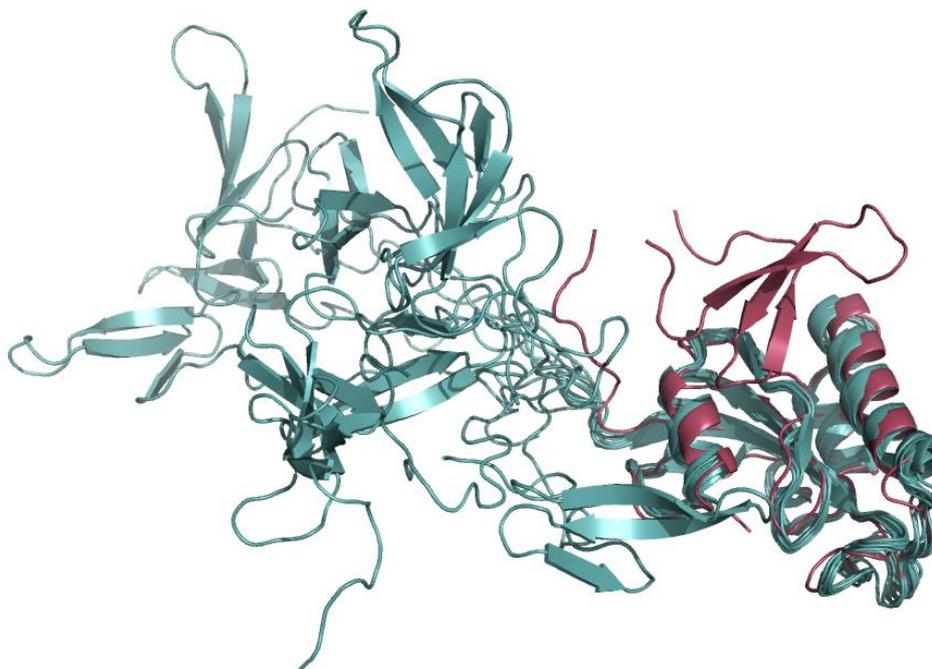


Рисунок 1. Совмещение структур 1PIN и 1NMV

Рассмотрим, сохраняются ли водородные связи в структурах, полученных двумя методами. Будем считать, что между донором протона и акцептором есть водородная связь, если расстояние между ними меньше 3,5 Å. Атом водорода должен быть на линии донор-акцептор или отклоняться от этой линии не более чем на 70 градусов. Для анализа выберем три водородные связи в структуре РСА:

- основную в альфа-спирали (рис. 2);
- водородную связь боковых цепей в ядре белка (рис. 3);
- водородную связь в петлях, выходящих на поверхность глобулы (рис. 4).

Результат сравнения наличия водородных связей и их длины представлен в таблице 1. Мы видим, что сохранение водородных связей зависит от их положения: основная связь в ядре белка есть во всех структурах (ядро молекулы «жесткое»). Водородная связь между боковыми радикалами в ядре присутствует только в кристалле, но не в растворе. Несмотря на это, атомы данной связи находятся на довольно близком расстоянии (менее 4,5 Å). Связь на поверхности белка сохраняется во всех моделях ЯМР. Возможно, этот участок ошибочно определен как петля, и должен быть отнесен к вторичной структуре.

Таблица 1. Подробные сведения о проанализированных водородных связях.

Донор	Акцептор	Положение	Расстояние в РСА, Å	% моделей ЯМР со связью	Расстояние в ЯМР		
					минимальное	максимальное	медиана
N LEU50	O ILE 148	основная в бета-листе	2,9	100	2,74	3,16	2,90
CE1 HIS 147	OG1 THR142	между боковыми цепями в ядре белка	2,7	0	3,76	4,44	4,10
N SER 88	O GLN 84	в петле на поверхности глобулы	3,0	100	2,55	2,95	2,65

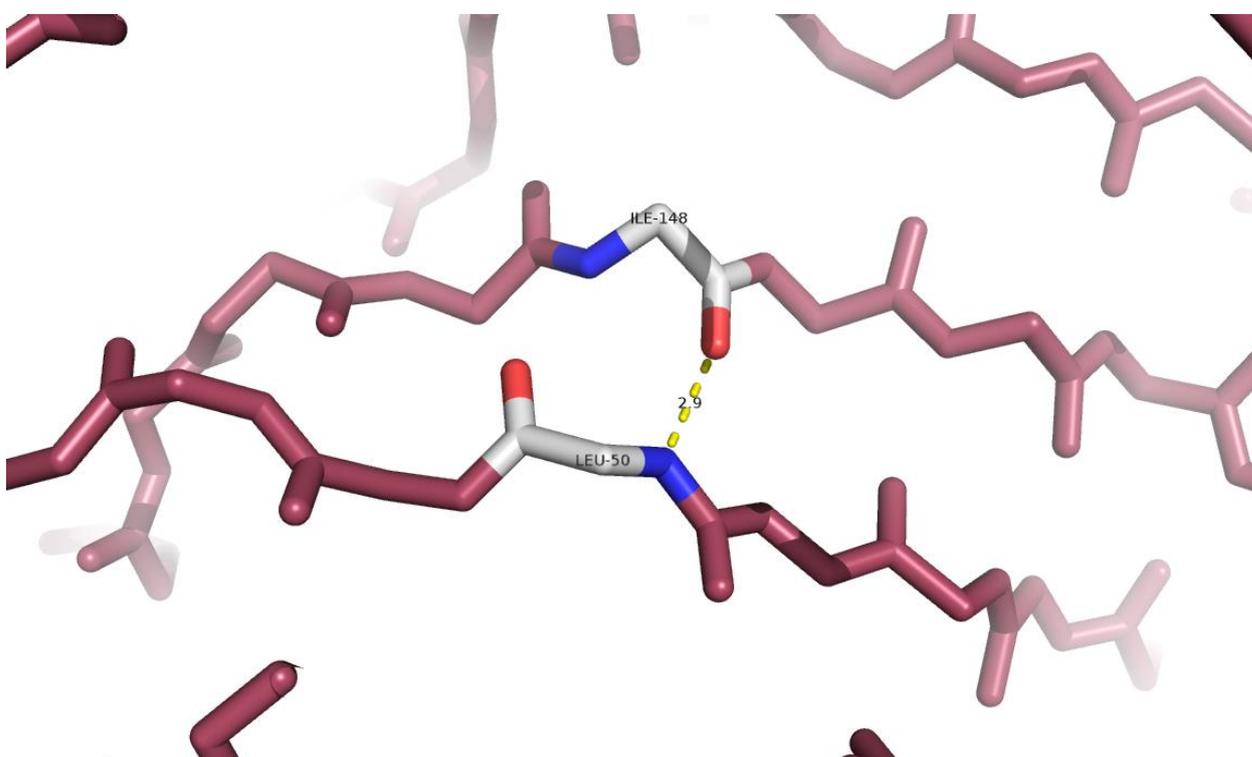


Рисунок 2. Основная водородная связь в бета-листе

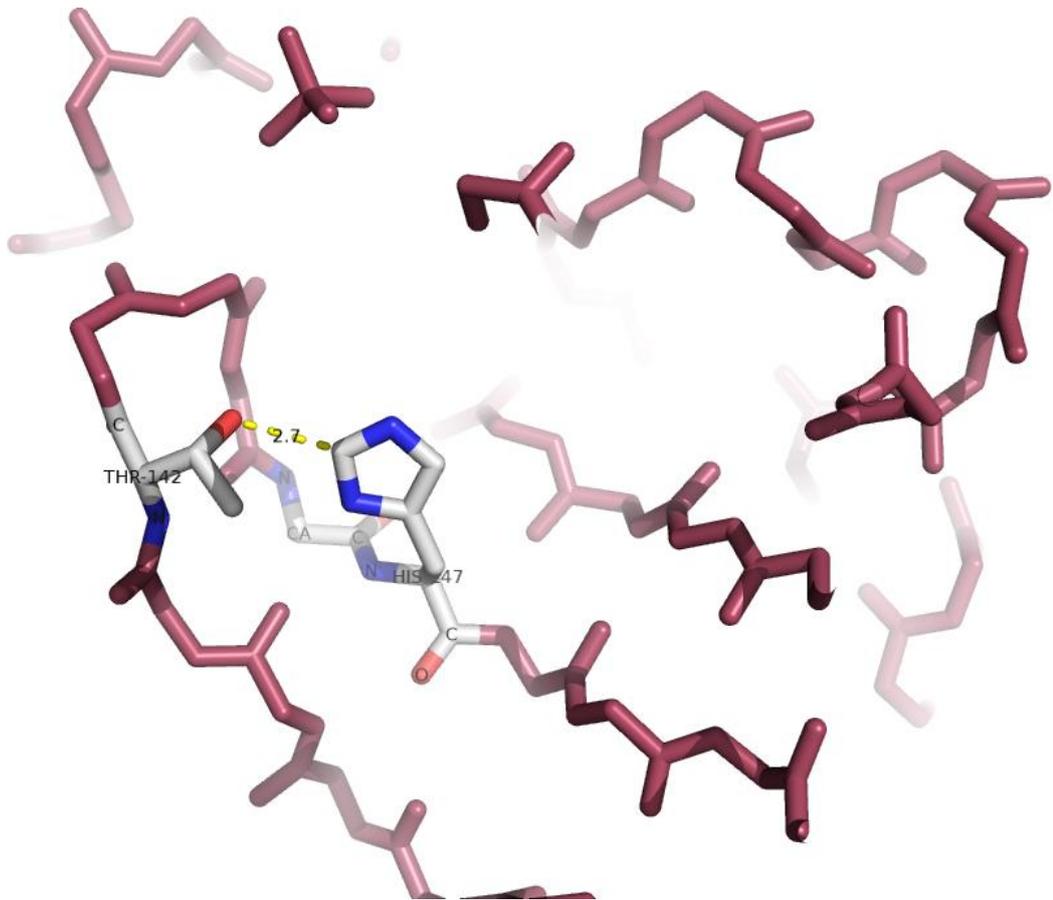


Рисунок 3. Водородная связь между боковыми радикалами в ядре белка

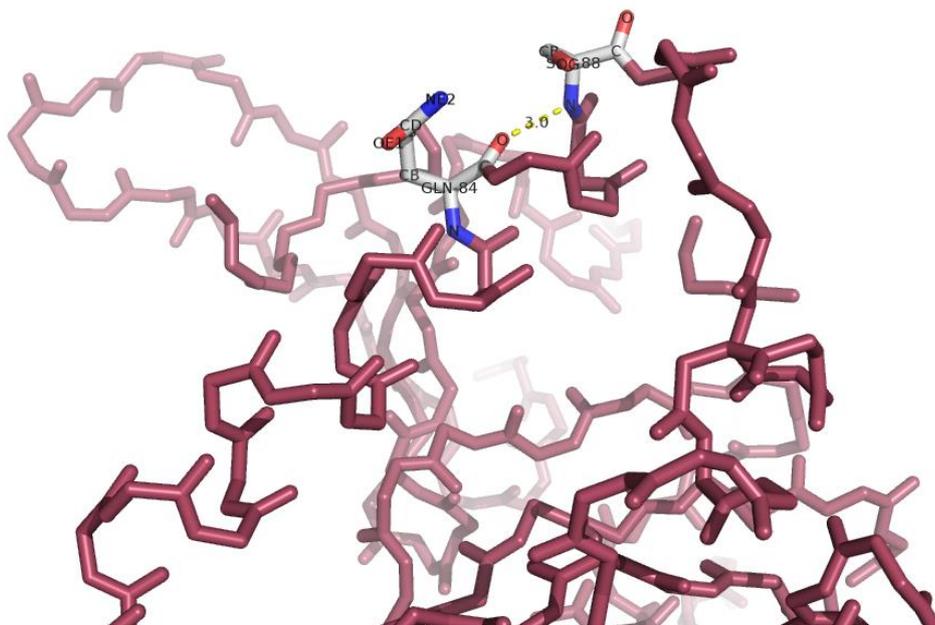


Рисунок 4. Водородная связь на поверхности белка