

Определение вторичной структуры

Для предсказания вторичной структуры структуры АНВА синтазы (идентификатор PDB 1B9H) была использована программа DSSP:

```
mkdssp -i 1b9h.pdb -o 1b9h.dssp
```

Выдача программы: [1b9h.dssp](#)

Результаты предсказания вторичной структуры программой DSSP и сравнение с разметкой в PDB-файле приведены в таблице 1. В файле выдачи DSSP перечислены все остатки по порядку, и для каждого из них написана буква, обозначающая, к какой вторичной структуре он принадлежит. В файле PDB по-другому - там перечислены элементы вторичной структуры с указанием остатков, которые их формируют. Границы бета-листов в DSSP и PDB совпадают. Спирали же оценивались по-разному: DSSP определяет границы так, что координата последнего остатка каждой спирали на один меньше, чем в PDB.

Таблица 1. Результаты определения границ элементов вторичной структуры программой DSSP.

Обозначение	Структура	DSSP	PDB
H	ALPHA HELIX	39-50	39-51
H	ALPHA HELIX	62-72	62-73
E	STRAND	55-59	55-59
E	STRAND	80-84	80-84