

Построение изображения электронной плотности вокруг остова полипептидной цепи

Для выполнения практикума был выбран белок 3e9a. Это структура 2-дегидро-3-деоксифосфооктонат альдозазы из *Vibrio cholerae*. Данная структура была опубликована в статье Crystal structure of 2-dehydro-3-deoxyphosphooctonate aldolase from *Vibrio cholerae* O1.

Для данного белка в БД есть EDS map, то есть карта электронной плотности (в pdb это называется Structure factors).

Белок соответствует критериям годности для практикума.

Для построения изображения электронной плотности вокруг остова полипептидной цепи была использована команда `isomesh new_surface, 3e9a, 1.5, visible, 2.5`

Получившиеся результаты визуализации электронной плотности с помощью программы PyMOL с различными уровнями подрезки продемонстрированы ниже.

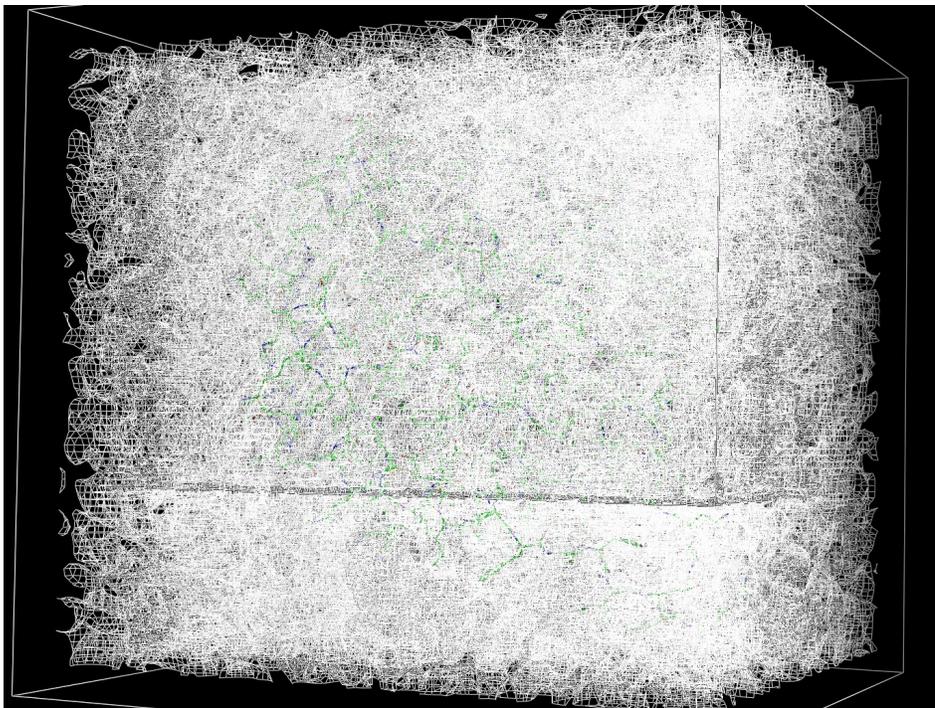


Рис.1. Уровень подрезки электронной плотности = 0. Остов полипептидной цепи показан палочками.

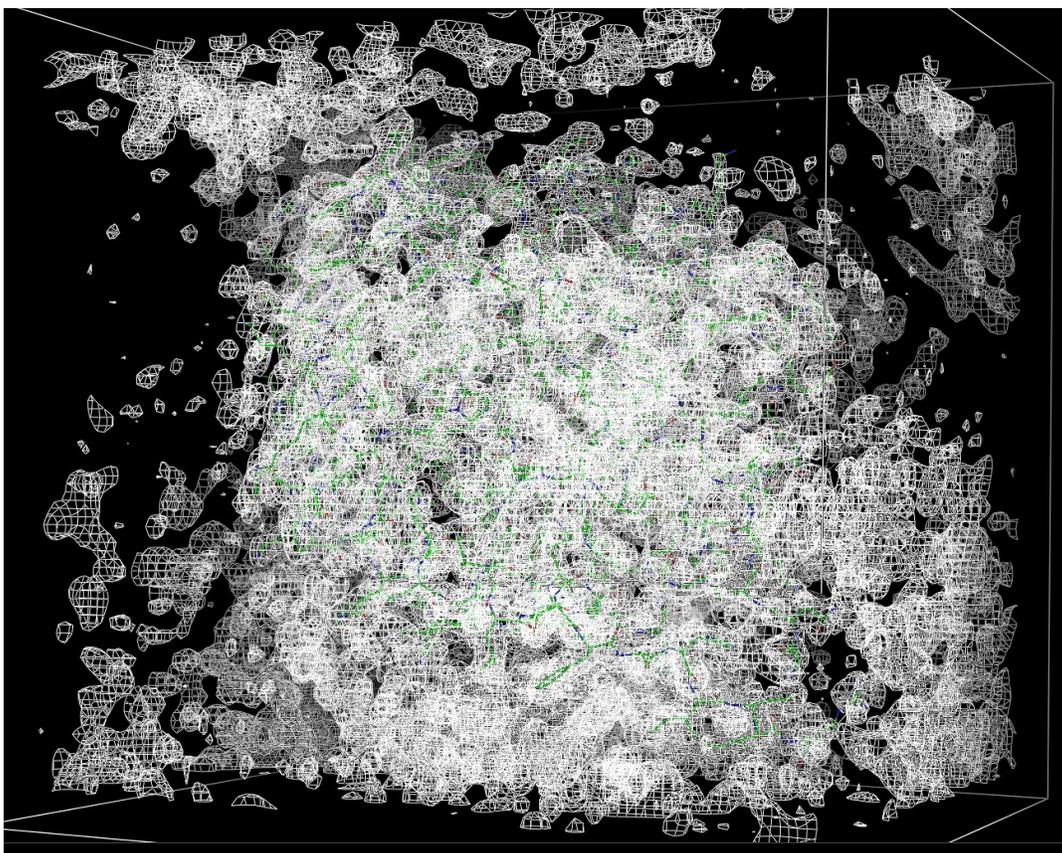


Рис.2. Уровень подрезки электронной плотности = 1. Остов полипептидной цепи показан палочками.

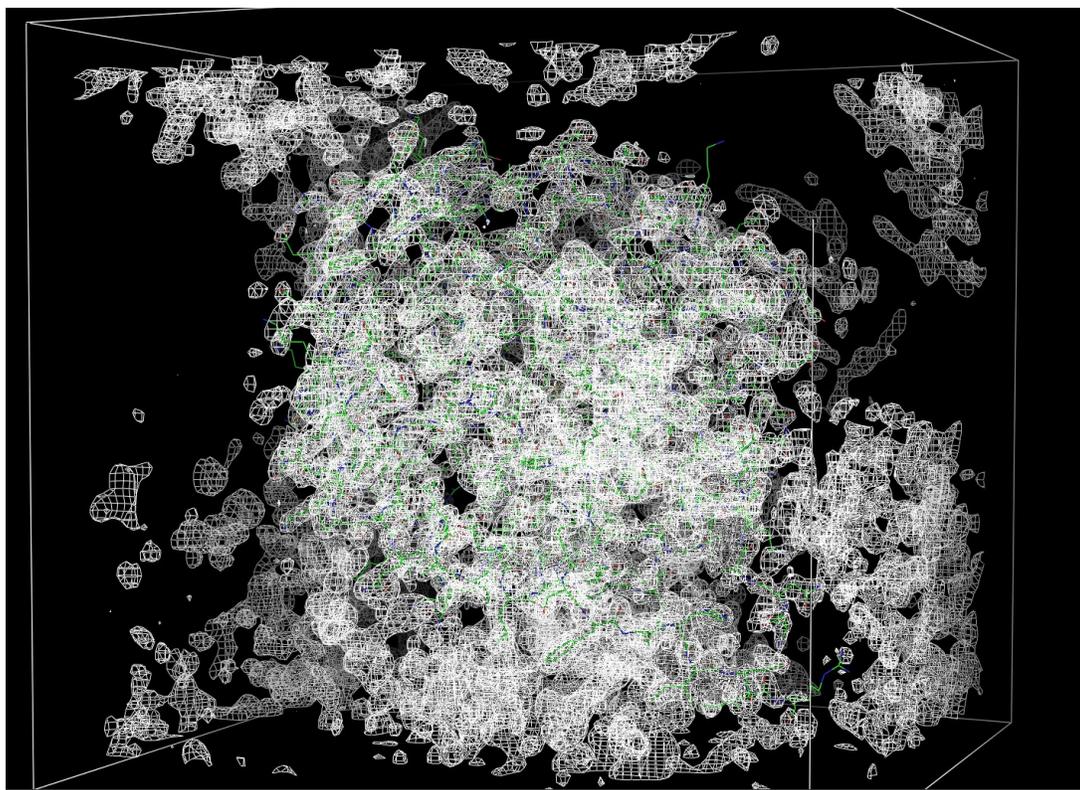


Рис.3.Уровень подрезки электронной плотности = 1,5. Остов полипептидной цепи показан палочками.

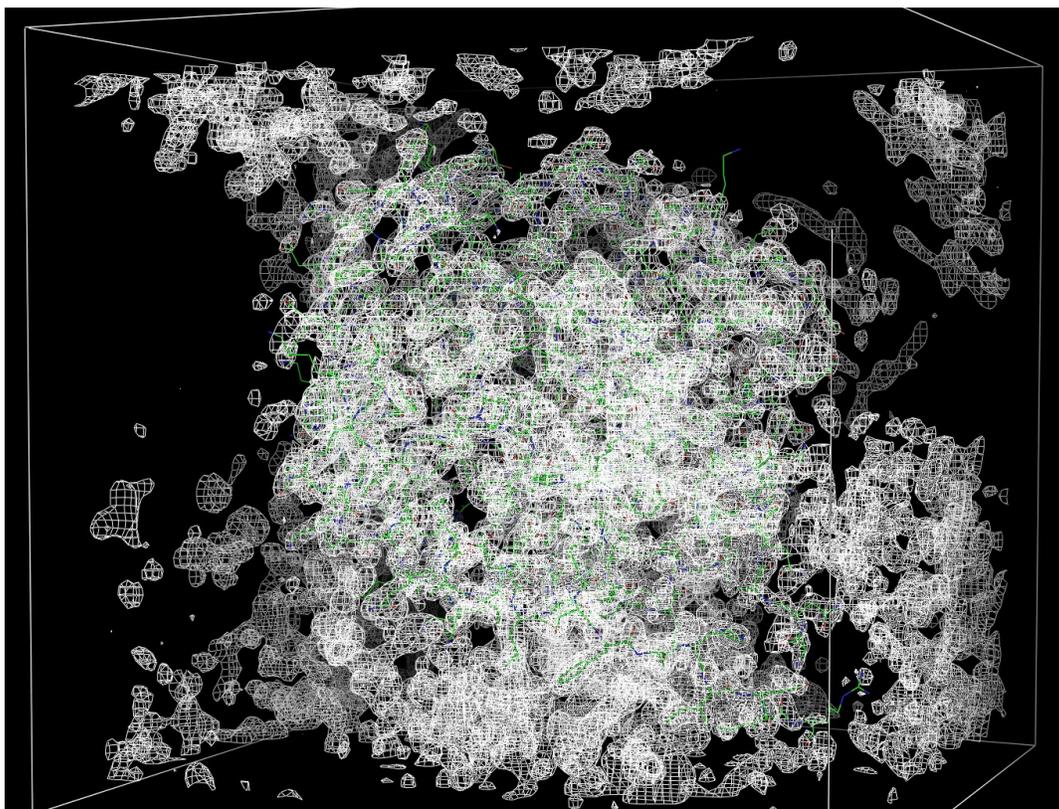


Рис.4.Уровень подрезки электронной плотности = 2.0. Остов полипептидной цепи показан палочками.

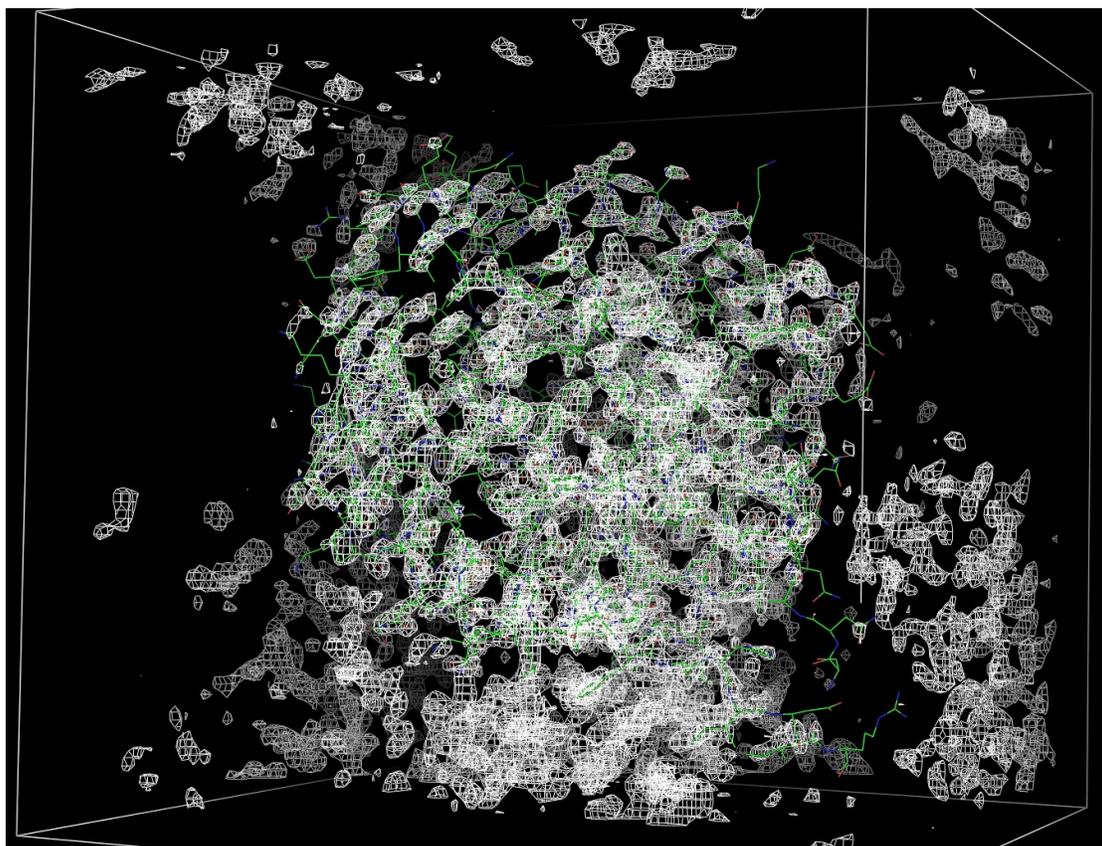


Рис.5. Уровень подрезки электронной плотности = 2.5. Остов полипептидной цепи показан палочками

Далее производилось построение изображения электронной плотности вокруг 3х аминокислот – ala, pro и glu, использовался спектр подрезок 1, 1.5, 2, 2.5, 3

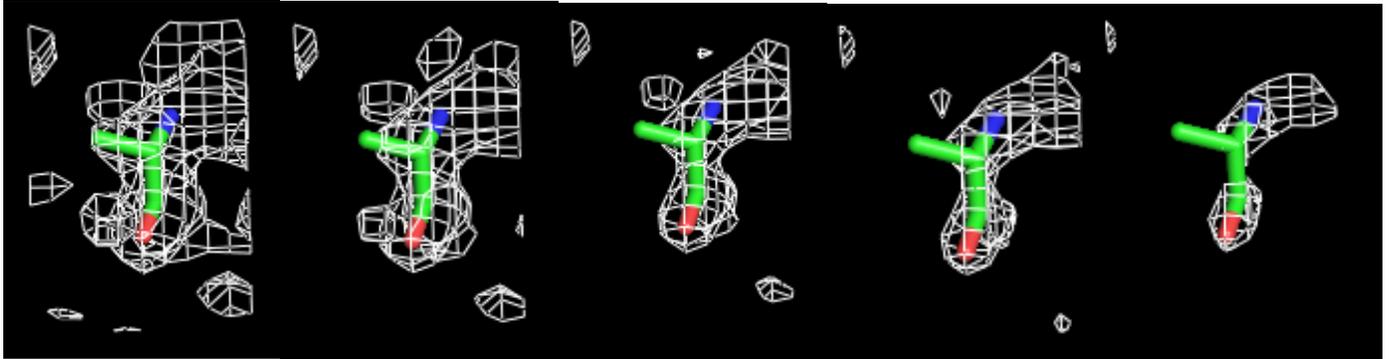


Рис. 6 Аминокислота Ala с изображением электронной плотности на спектре подрезок 1, 1.5, 2, 2.5, 3 слева направо

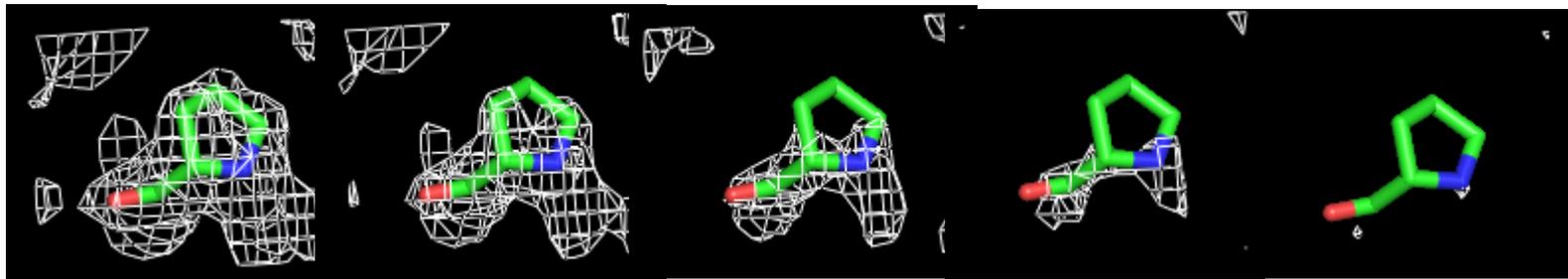


Рис. 7 Аминокислота Pro с изображением электронной плотности на спектре подрезок 1, 1.5, 2, 2.5, 3 слева направо

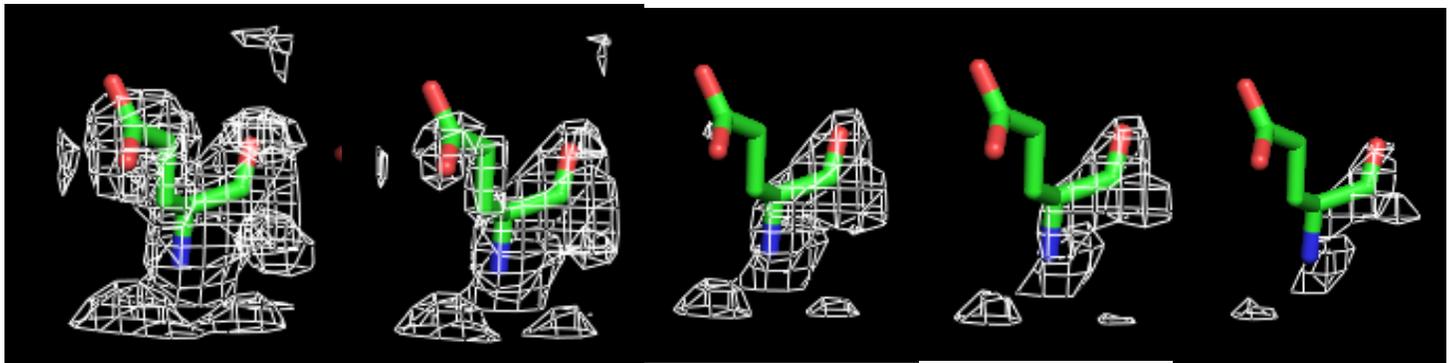


Рис. 7 Аминокислота Glu с изображением электронной плотности на спектре подрезок 1, 1.5, 2, 2.5, 3 слева направо

Даже на уровнях подрезки электронной плотности 1.0, электронная плотность окружает не все атомы, входящие в состав аминокислот для Glu.

При повышении уровня подрезки электронной плотности до 1.5 не все атомы окружены электронной плотностью для всех трех аминокислот.