

Сравнение трех водородных связей в структурах белка, расшифрованных с помощью ЯМР и РСА.

Был выбран белок 1afh, для которого есть и ЯМР, и РСА структура. PDB id 1afh и 1fk0.

Укладки структур ЯМР и РСА сходны. Таким образом, данный белок удовлетворяет всем требованиям для выполнения задания.

1afh и 1fk0 были открыты в PyMol и совмещены с помощью команды align

Все 15 моделей были одновременно отображены с помощью команды set all_states, on.

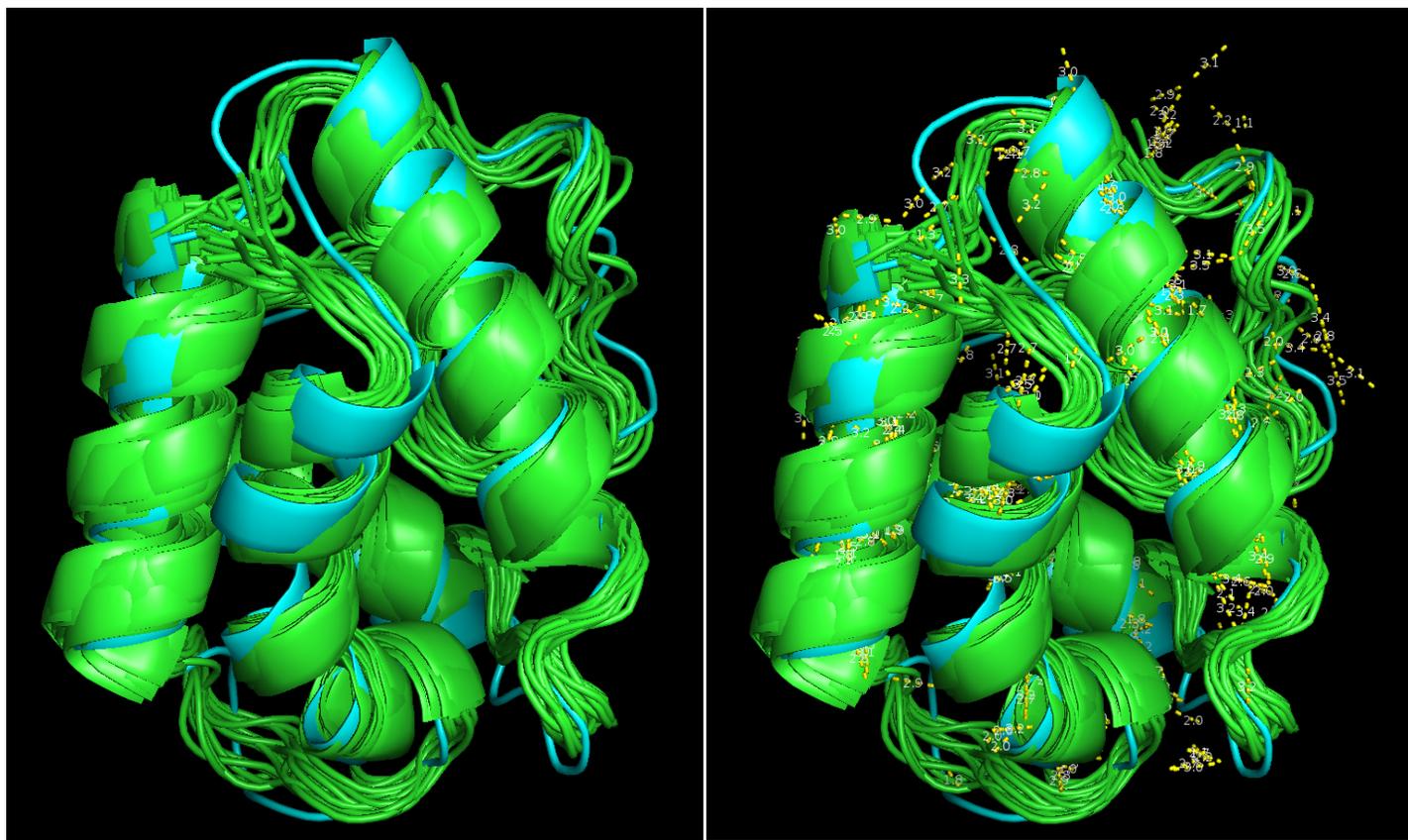


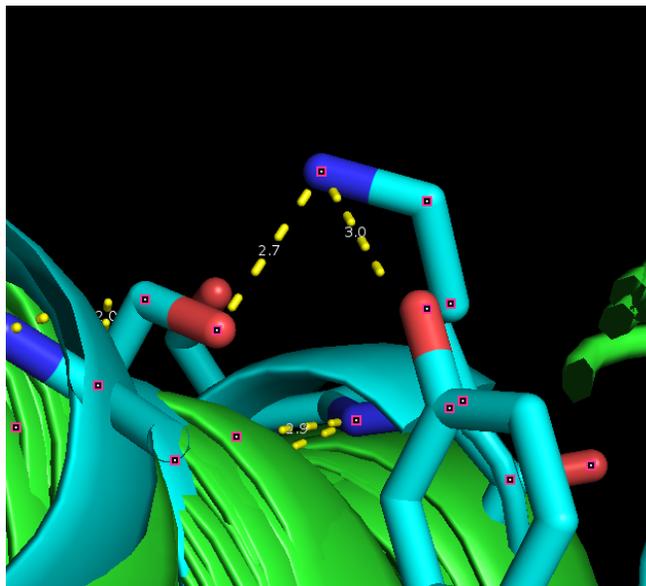
Рис.1. Результат совмещения структур 1afh и 1fk0

Слева представлена структура без водородных связей, справа с водородными связями (менее 3.5).

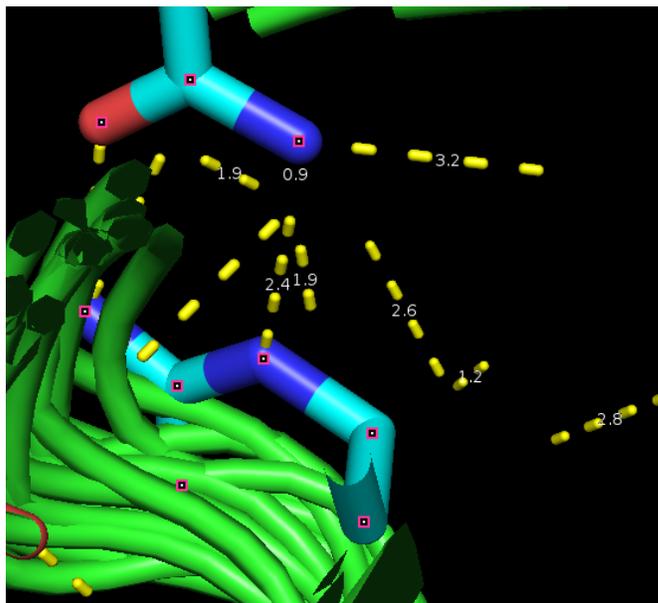
Далее были найдены водородные связи были найдены с помощью команды distance hhbonds в PyMOL

В структуре, расшифрованной с помощью РСА было выбрано 3 примера водородных связей

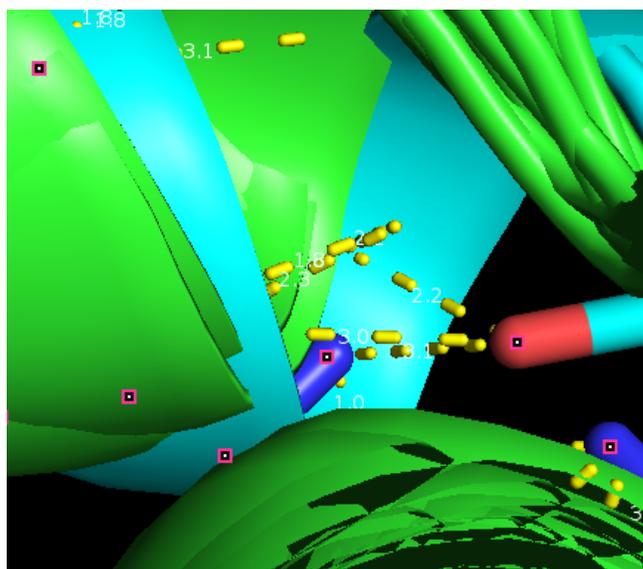
Первый пример это водородная связь боковых цепей в ядре белка. Рассматриваемая связь (Lys 12 N –Tyr 67 OH) имеет длину 3.



Второй пример – водородная связь в петлях, выходящих на поверхность глобулы. Рассматриваемая связь Arg 46-Asn 93 имеет длину 2.4.



Третий пример – водородная связь в в альфа-спирали. Рассматриваемая связь Asn 64 OH -Asn 67 N имеет длину 3.0.



Сравнение водородных связей по данным РСА и ЯМР представлено в таблице 1.

Таблица 1

Тип связи	Длина по данным РСА	Встречаемость в ЯМР структуре	Минимальная длина связи	Максимальная длина связи	Медианная длина связи
Связь в альфа-цепи	3.0	100%	2.53	3.258	2.707
Связь боковых цепей в ядре белка	3.0				
Связь боковых цепей на поверхности глобулы	2.4				

Таким образом, основная водородная связь в альфа-спирали присутствует в 100% случаев, то есть во всех ЯМР структурах, и она изменяется от модели к модели в некотором диапазоне. Связи этого типа необходимы так как стабилизируют альфа-спираль. Оставшиеся водородные связи не содержатся в ЯМР моделях. Либо эти водородные связи являются артефактом кристаллизации, либо ориентация этих остатков очень динамична.