

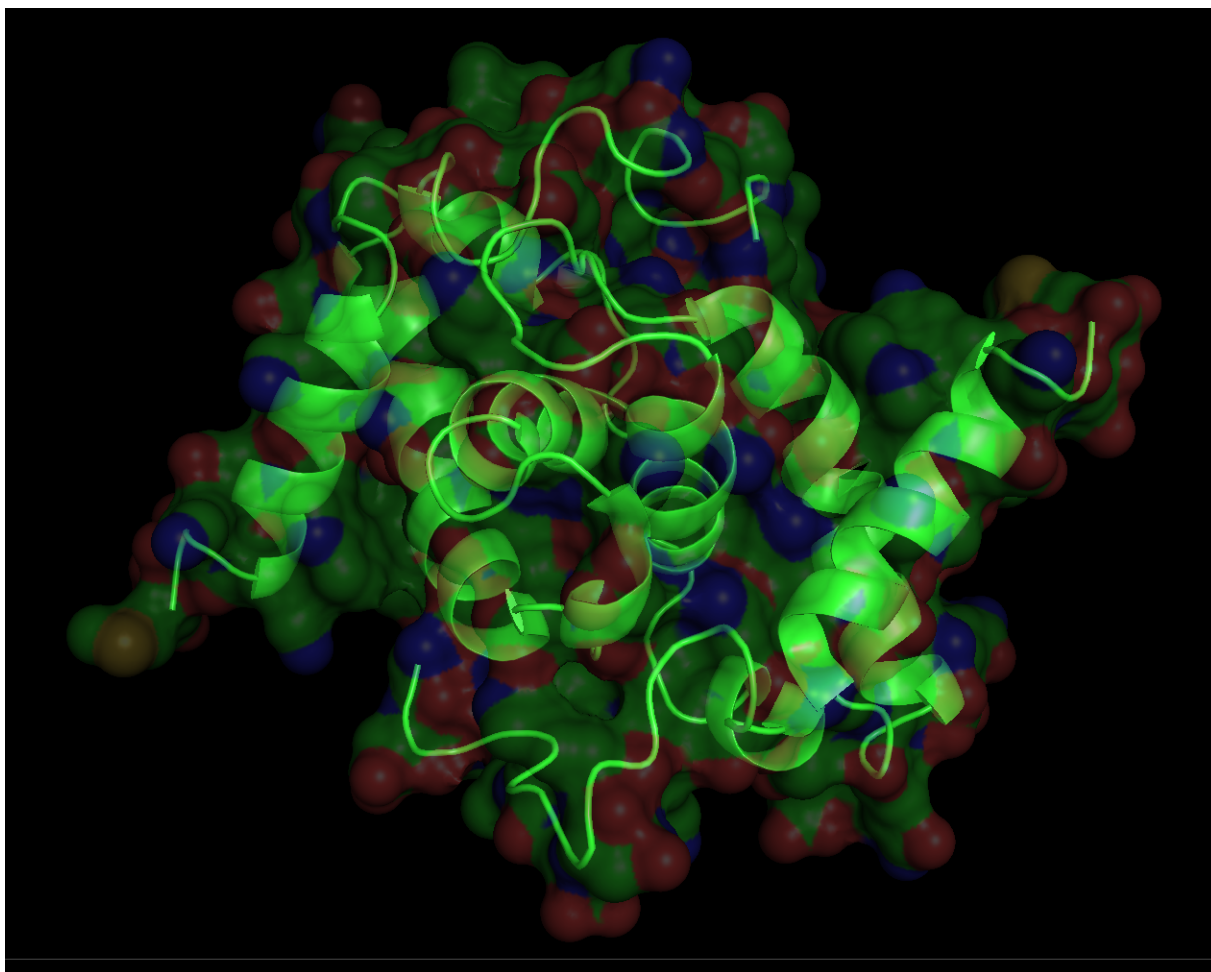
# Построение и анализ поверхностей в PyMOL

Из базы данных PDB была выбрана структура 5nko. Это С терминальный конец белка HPF (Hibernating Promoting Factor) из *Staphylococcus aureus*. Его структура, расшифрованная в это году, позволила установить механизм, благодаря которому происходит ribosome hibernation.

Оказывается, что N терминальный конец этого белка присоединяется к 30S субъединице, как наблюдалось ранее на гомологах из того же семейства. С – терминальный конец (рассматриваемый в данном контексте) инициирует димеризацию рибосом.

Структура С терминального конца белка представляет из себя гомодимер, получена методом ЯМР и содержит 10 моделей (conformers submitted).

Было построено изображение молекулярной поверхности для полной структуры биомолекулы на фоне cartoon модели биомолекулы.



*Изображение молекулярной поверхности белка 5nko на примере первой модели. Прозрачность 0.7, surface\_quality 2.*

Для того чтобы выявить зависимость площади поверхности, доступной для растворителя, от общей площади поверхности, для каждой из 10 моделей были найдены оба этих значения.

На основании полученных данных был построен график зависимости площади поверхности, доступной для растворителя, от общей площади поверхности, и посчитана линейная регрессия для этого графика. Корреляция (хотя по 10 точкам она не является достаточно достоверной) составляет -0.609.

Результаты линейной регрессии (модуль Linregress в python):

наклон = -2.3721657875590325,

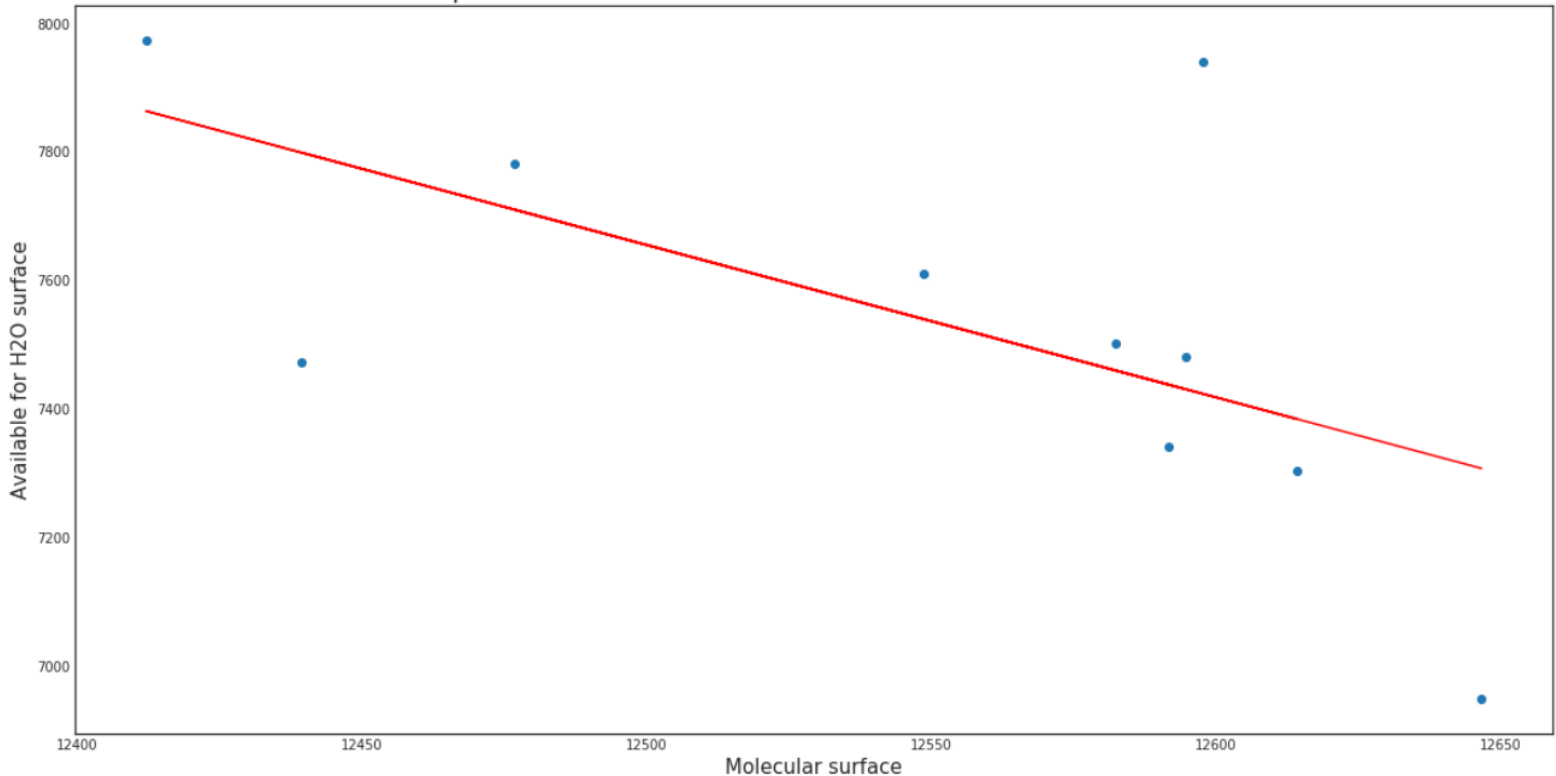
пересечение оси  $ox$  = 37306.666759055326,

R значение (не квадрат) = -0.60967192368357481,

pvalue=0.061291576209462149,

stderr=1.0904039827275336

Dependence of available for H2O surface on overall surface

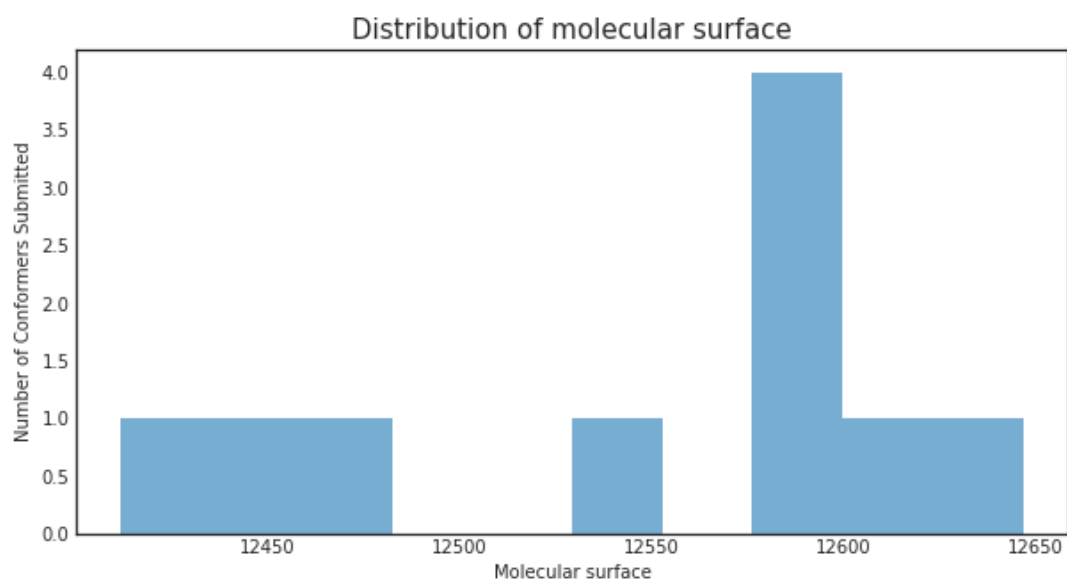


Стоит отметить что наблюдается достаточно большое количество аутлайеров, скорее всего они вызваны случайными причинами.

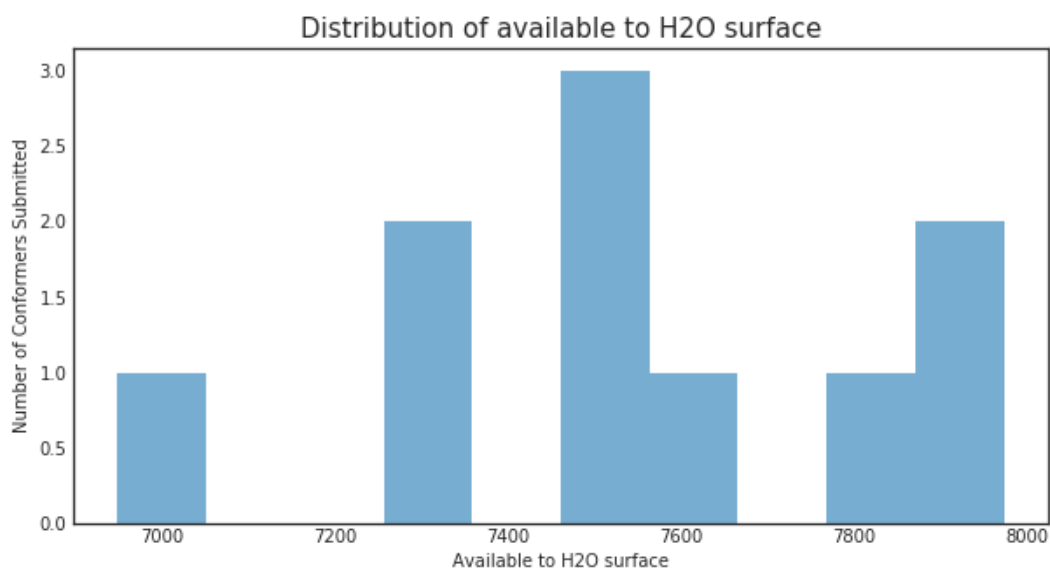
То, что полученная зависимость отрицательная, скорее всего указывает просто на слишком небольшое количество наблюдений. Должна была бы наблюдаться тенденция к увеличению значений (при возрастании площади молекулярной поверхности, увеличивается площадь поверхности, доступной для растворителя), так как при возрастании площади молекулярной поверхности увеличивается и площадь доступная для растворителя.

Было рассмотрено также распределение значений площади общей поверхности.

При большой выборке ожидаемо было бы наблюдать распределение близкое к нормальному, на 10 моделях этого не наблюдается. Но хотя бы распределение унимодальное.



Гистограмма распределения общей молекулярной поверхности



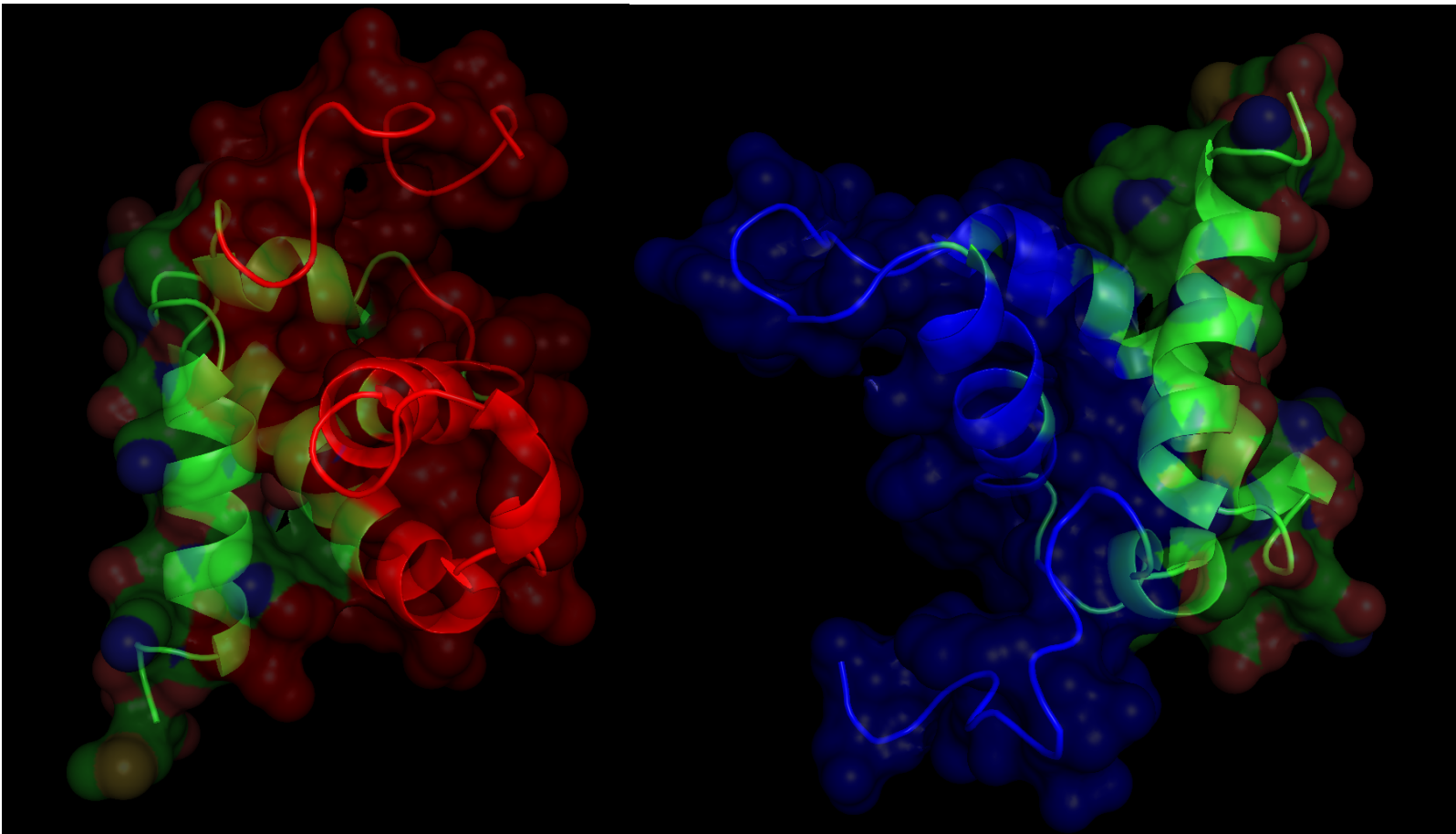
Гистограмма распределения доступной для H<sub>2</sub>O молекулярной поверхности

Далее была исследована поверхность контакта между двумя субъединицами белка. Для этого было выделено два множества остатков на границе этих субъединиц с использованием команд:

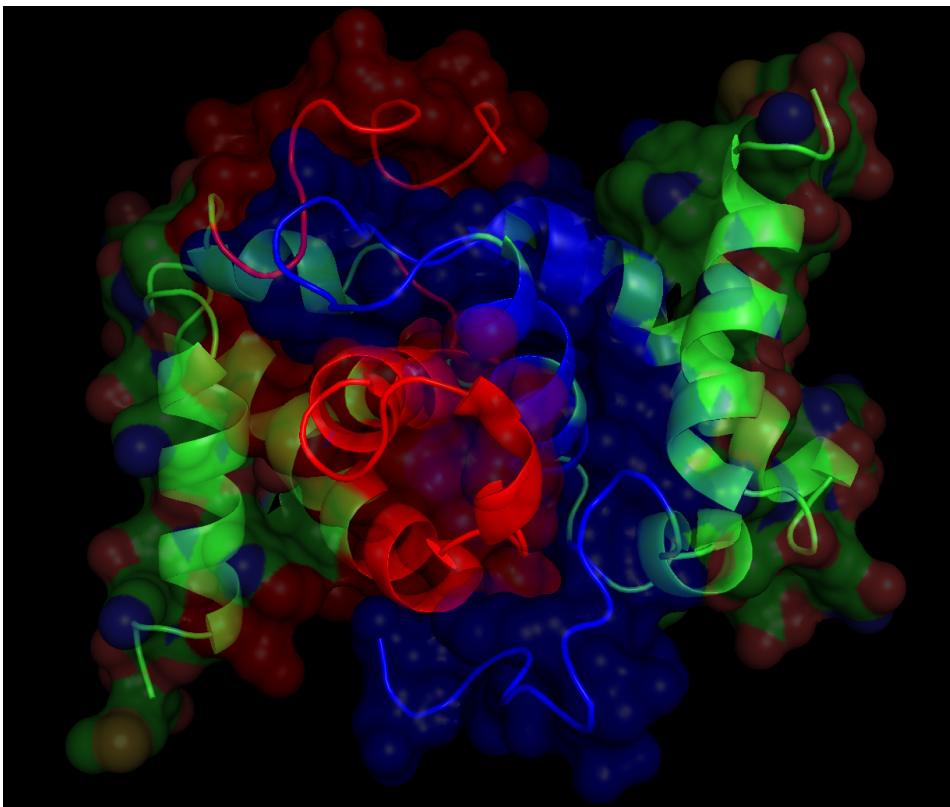
```
create a, byres chain A and 5nko_0001 and (chain B around 3.5)
create b, byres chain B and 5nko_0001 and (chain A around 3.5)
show surface, a
show surface, b
set transparency, 0.7
```

Множества a и b были изображены синим и красным соответственно.

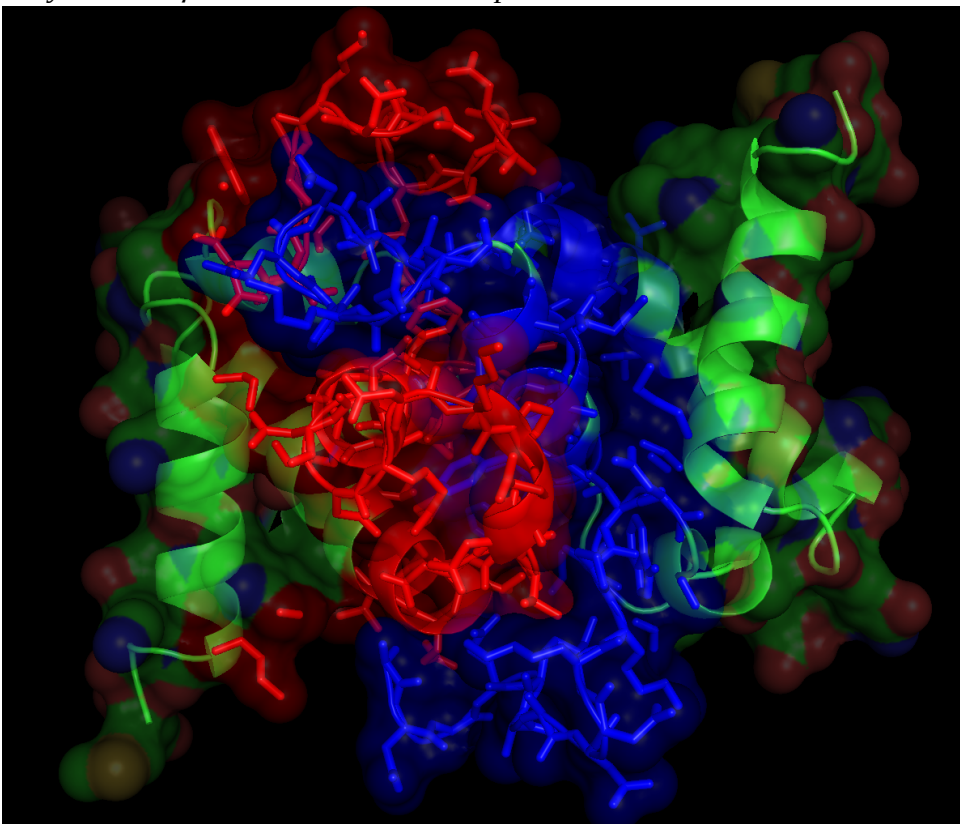
Если подробнее посмотреть на остатки в зоне контакта (добавить отображение контактирующих остатков палочками), то можно видеть что поверхности субъединиц в участке контакта практически соприкасаются и хорошо соответствуют друг другу.



*Поверхности контакта для субъединиц на примере первой модели, изображенных разнесенными в пространстве.*



*Поверхности контакта для субъединиц на примере первой модели. Контактирующие остатки из разных субъединиц выделены синим или красным.*



*Поверхности контакта для субъединиц на примере первой модели. Контактирующие остатки из разных субъединиц выделены синим или красным и изображены палочками (sticks).*