

Практикум 2. Электронная плотность

Задание 1

Для анализа были скачаны две структуры альфа-литической протеазы: 2H5C (разрешение 0.82 Å) и 1GBM (разрешение 2.28 Å). При сравнении структур (Рис.1,2) можно увидеть, что в целом они идентичны, однако в первой есть атомы водорода и большее число молекул воды.

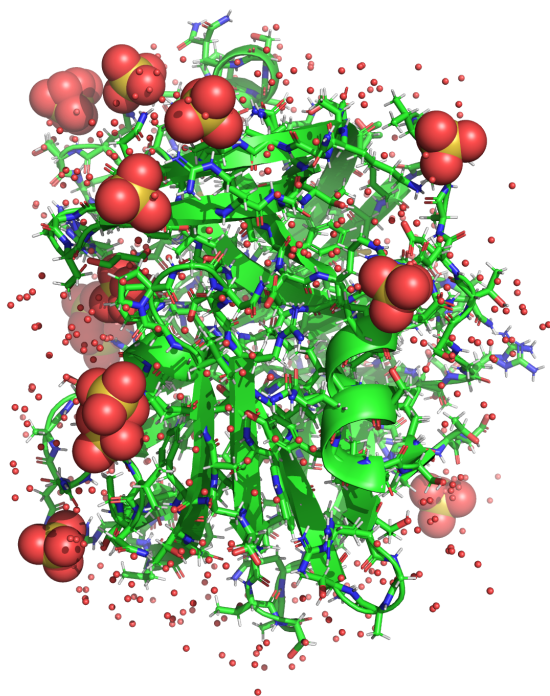


Рис. 1 Структура 2H5C

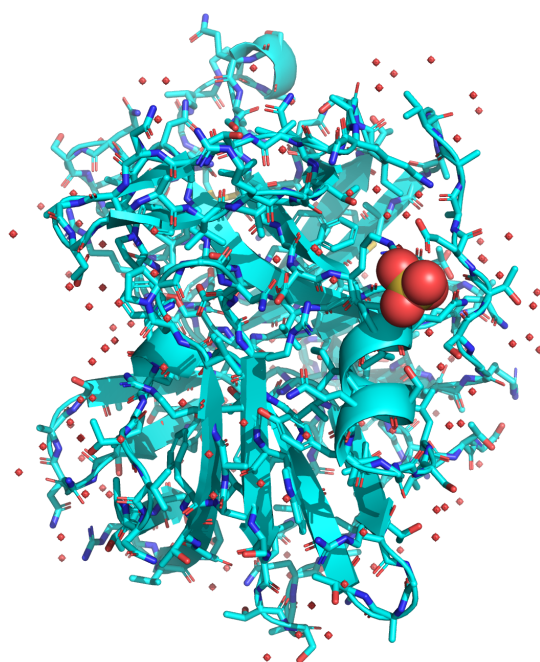


Рис. 1 Структура 1GBM

Для дальнейшего анализа были рассмотрены карты электронной плотности. На Рис. 3 и 4 отображена электронная плотность одного и того же региона белка для двух структур. В случае структуры 1GBM мы видим, что по представленной электронной плотности довольно сложно восстановить структуру, так как она не четкая и окружает не каждый тяжелый атом. Электронная плотность 2H5C при этом сильно более четкая, она хорошо согласуется с положениями отдельных атомов, из чего можно сделать вывод о ее более высоком разрешении, что соответствует информации о разрешении из PDB.

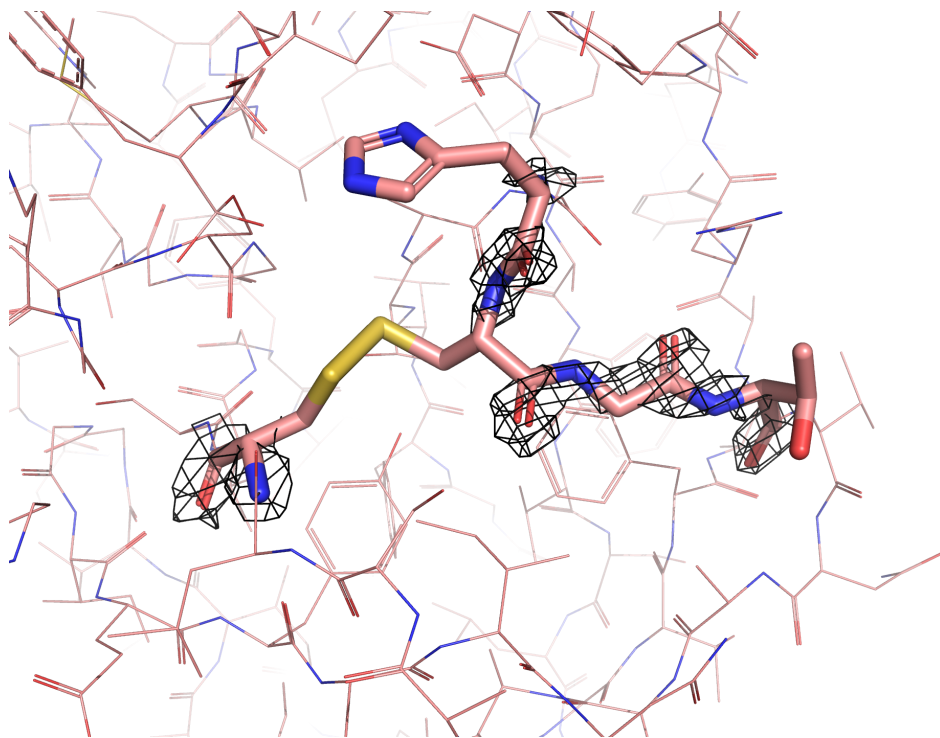


Рис. 3 Структура 1GBM (mesh, 2 level). PyMOL session

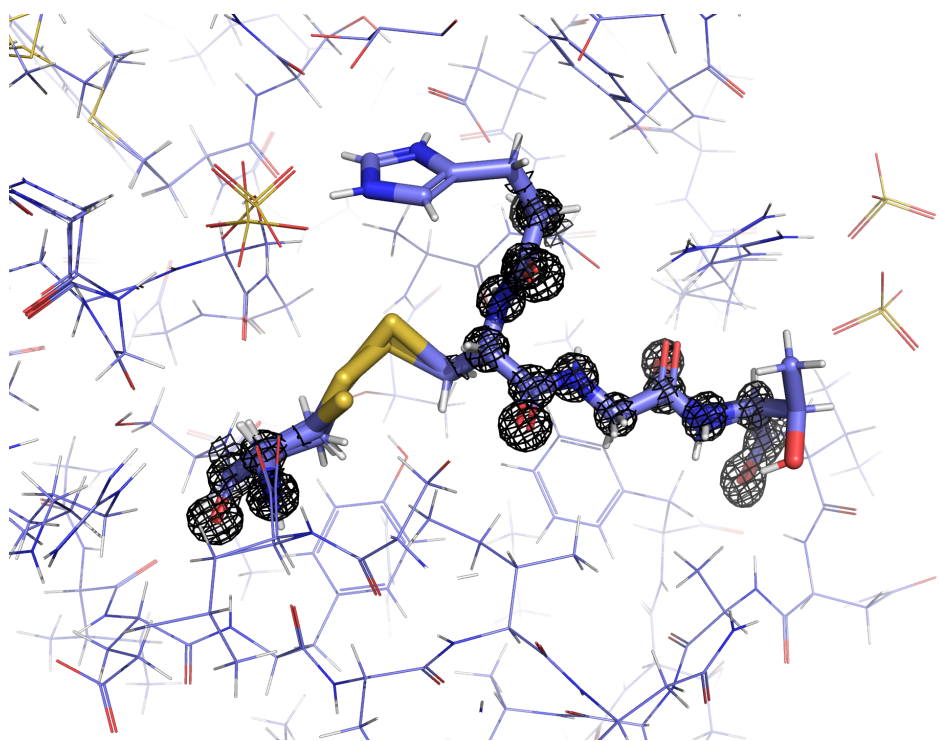


Рис. 4 Структура 2H5C (mesh, 2 level). PyMOL session

Задание 2

Далее была рассмотрена электронная плотность фактора свёртывания крови Ха (PDB ID: [4BTI](#)). Была построена серия mesh с разными уровнями подрезки (Рис. 5-7). Из рисунков можно заметить, что с увеличением уровня подрезки доля остова белка, покрытого mesh, становится меньше. При этом в первую очередь речь идет о концах молекулы и петлях (на уровне подрезки 3 они практически нигде не покрыты mesh). По-видимому, такая тенденция связана с тем, что эти регионы более подвижны. [PyMOL session](#).

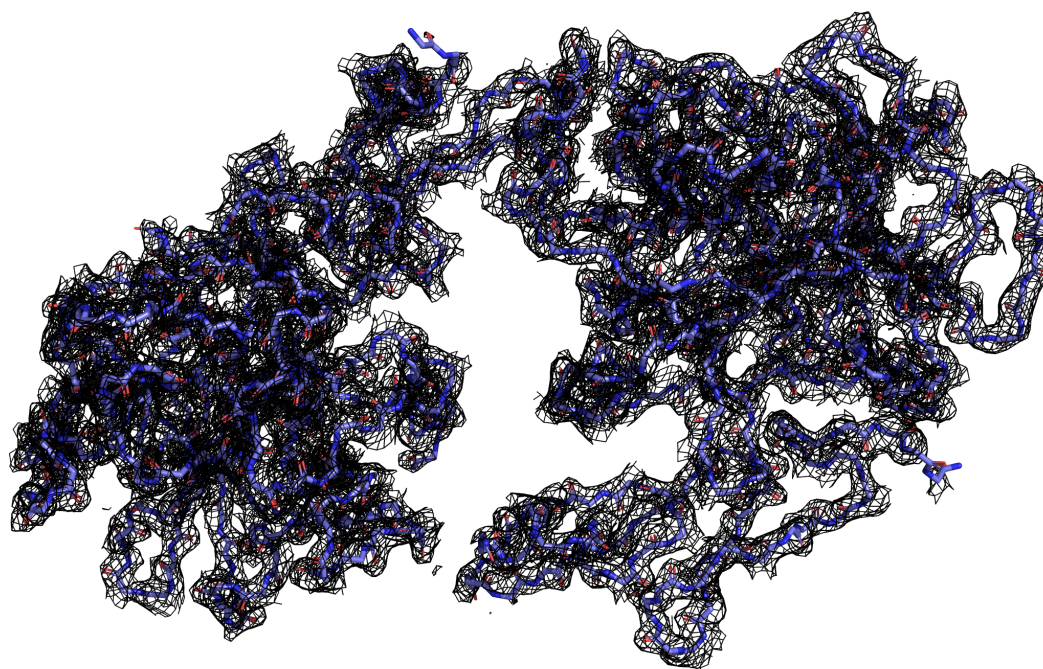


Рис. 5 Электронная плотность белка с уровнем подрезки 1

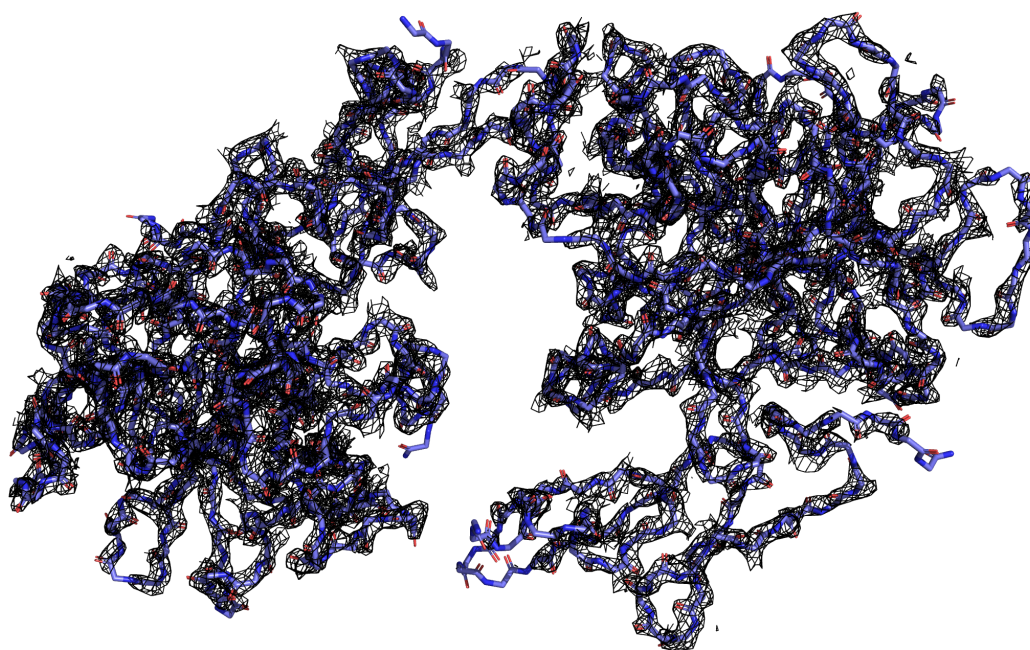


Рис. 6 Электронная плотность белка с уровнем подрезки 2

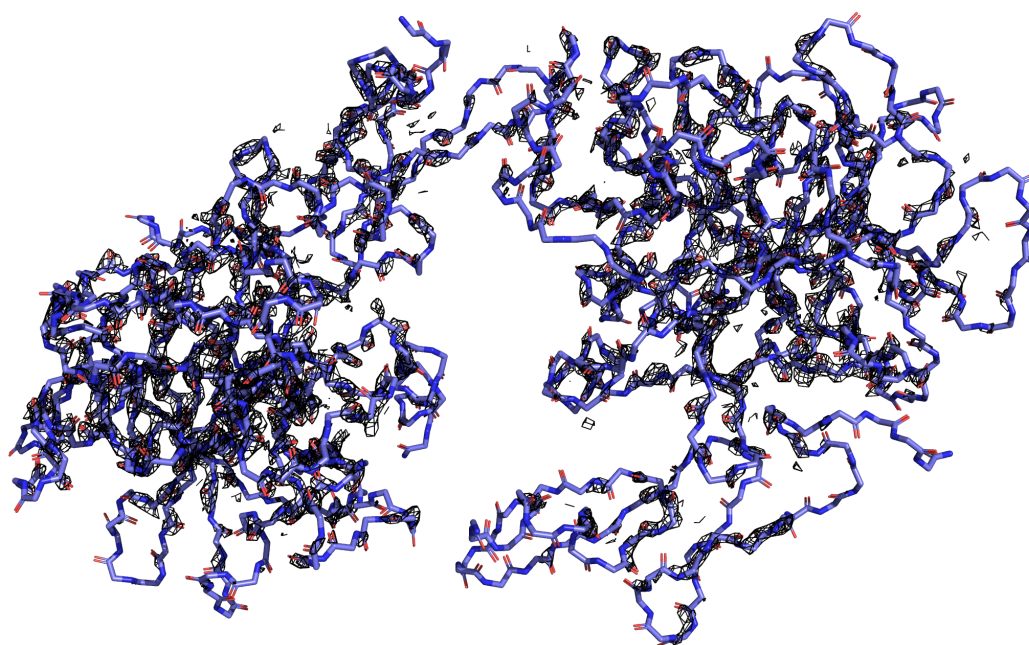


Рис. 7 Электронная плотность белка с уровнем подрезки 3

Задание 3

В этом задании анализировалась электронная плотность лиганда белка из задания 2, также на уровнях подрезки 1, 2 и 3 (Рис. 8-10). На уровне 1 все атомы полностью покрыты электронной плотностью, при увеличении уровня подрезки количество покрытых атомов снижается. В первую очередь это атомы углерода, не участвующие в образовании пептидной связи. Дольше всего при этом электронная плотность сохраняется вокруг атомов азота, серы, кислорода, хлора и фтора, наиболее электроотрицательных элементов. PyMOL session.

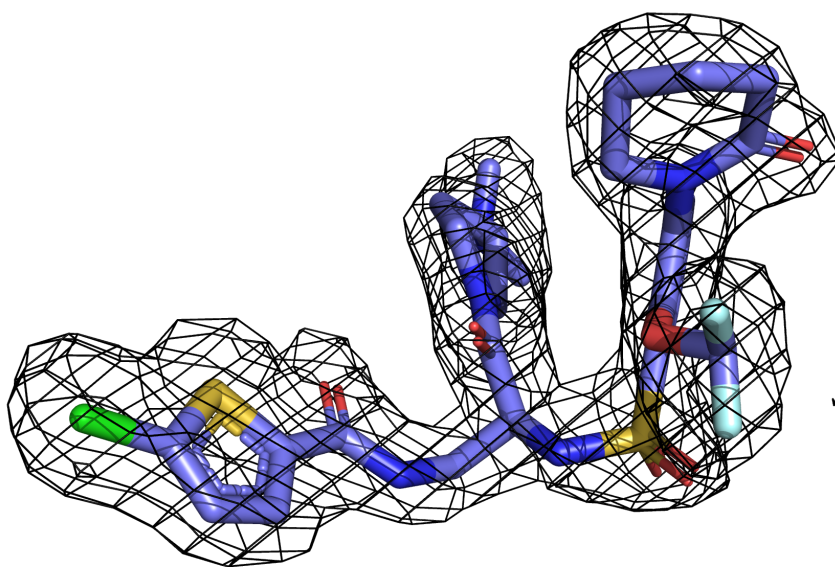


Рис. 8 Электронная плотность лиганда с уровнем подрезки 1

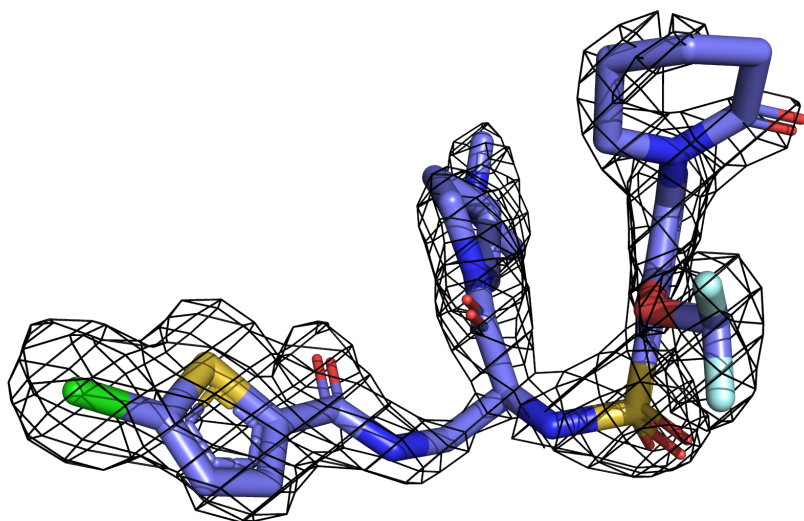


Рис. 9 Электронная плотность лиганда с уровнем подрезки 2

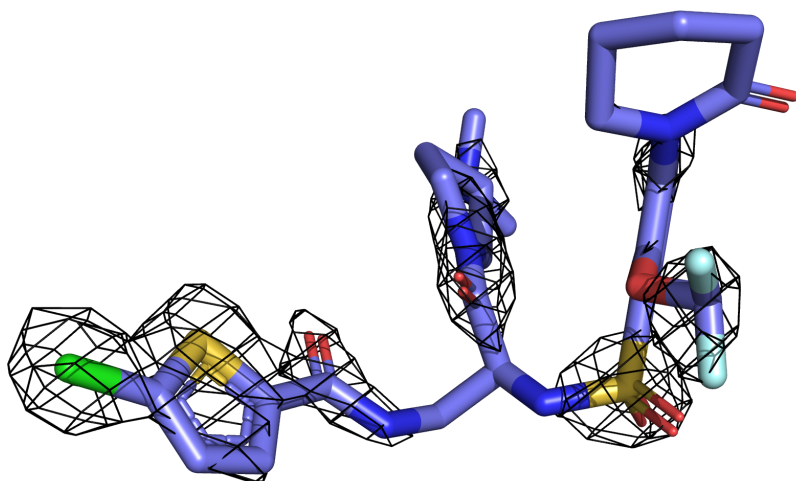


Рис. 10 Электронная плотность лиганда с уровнем подрезки 3