

Практикум 5. Протонирование

В данном практикуме требовалось изучить особенности, присущие белкам при кристаллизации, происходившей при низких значениях pH. Для анализа был выбран белок сциталидоглутаминовая пептидаза (PDB ID: 2IFR), структура которого была получена при pH 4. Для протонирования остатков был использован сервис [PDB2PQR](#). Из log файла, выданного программой, были выбраны аминокислоты с pKa выше, чем pH кристаллизации: аспартат 137 и глутамат 149. Далее были проанализированы взаимодействия этих остатков.

Протонирование аспартата 137 выглядит правдоподобно: благодаря протону аспартат может образовывать водородную связь с остатком валина 151 (Рис. 1). Местонахождение протона и длина связи адекватны.

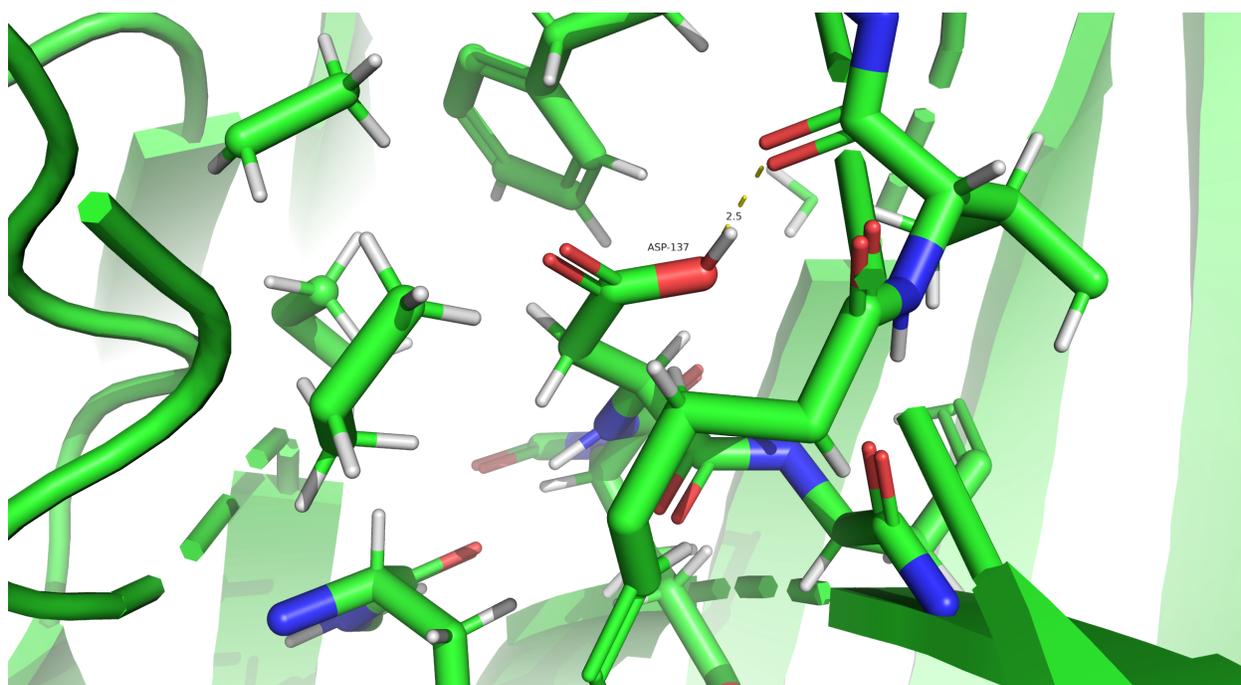


Рис. 1 Взаимодействие остатка аспартата 137 с окружением. [PyMOL session](#)

Для глутамата 149 протонирование также выглядит разумным. Глутамат мог бы образовывать водородную связь с соседним остатком аспартата с помощью водорода. Также я рассмотрела все протонированные остатки Asp, Glu, His с

самыми высокими рКа и их взаимодействия с окружением было правдоподобным либо эти остатки распологались с краю молекулы и не взаимодействовали ни с чем.

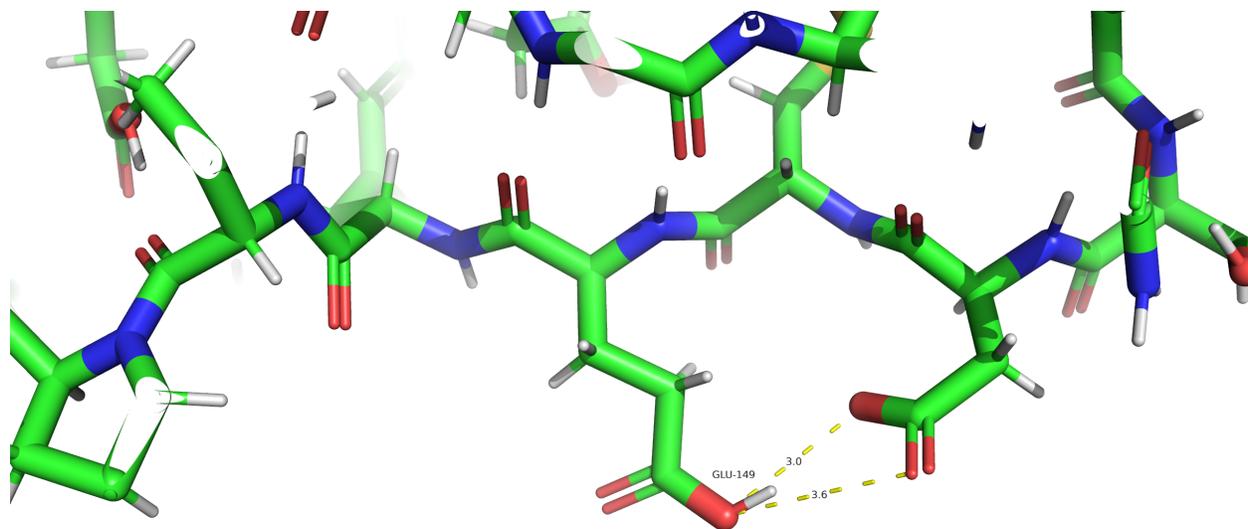


Рис. 2 Взаимодействие остатка глутамата 149 с окружением. PyMOL session