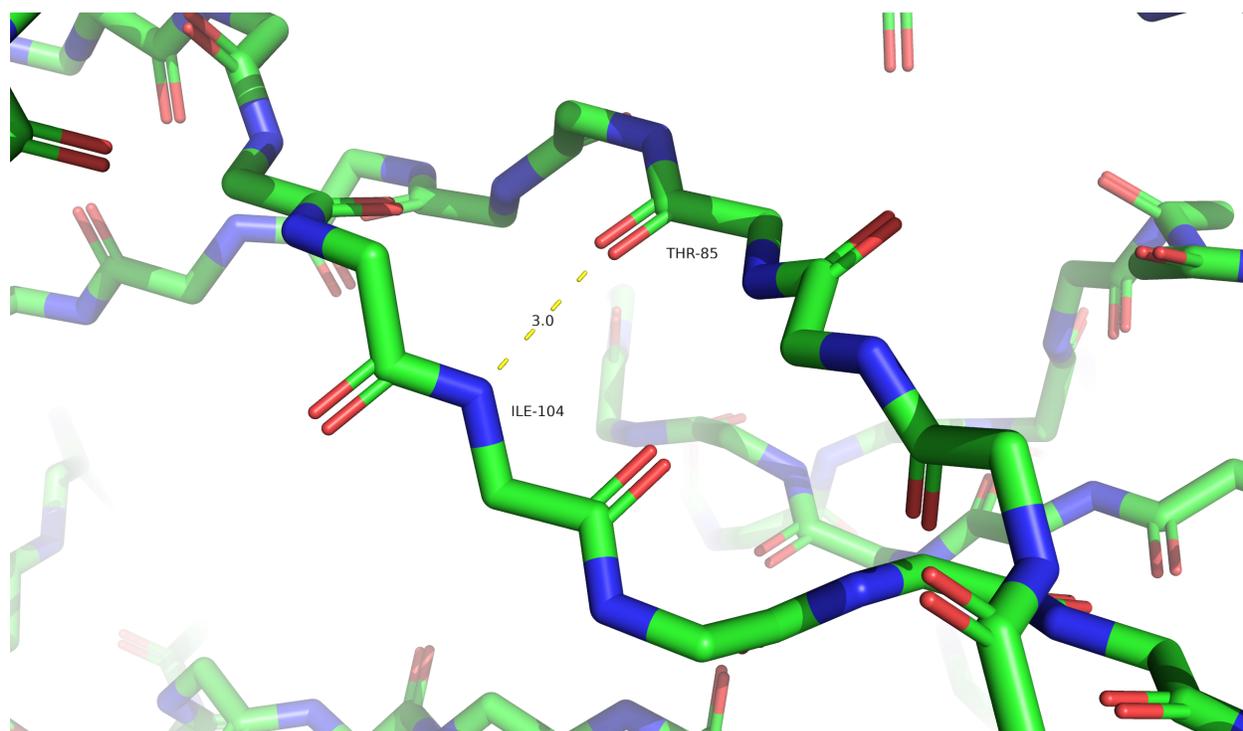


# Практикум 6.

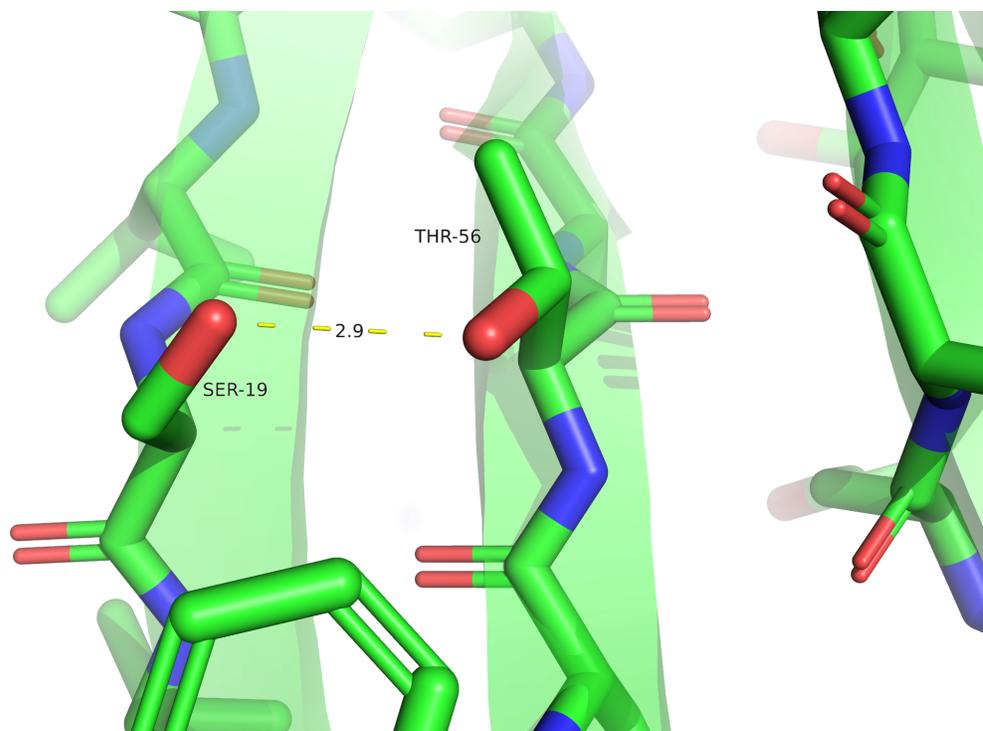
## Задание 1

В данном практикуме сравнивались водородные связи в двух моделях структуры белка (фактора роста нервов): первая получена методом ЯМР (PDB ID: 6YW8), вторая – методом РСА (PDB ID: 1WWW).

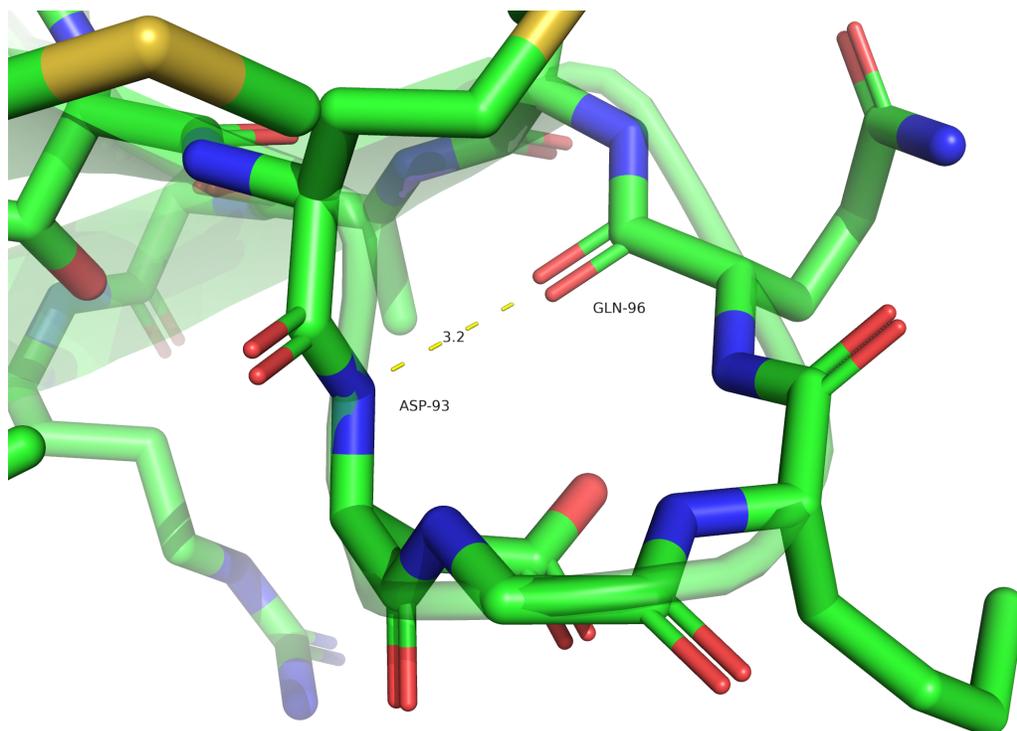
В структуре, полученной методом РСА, были выбраны 3 водородные связи (Рис. 1-3).



**Рис. 1** Водородная связь ILE104-THR85 между атомами остова в бета-листе ядра белка.  
PyMOL session



**Рис. 2** Водородная связь SER19-THR56 между боковыми цепями в бета-листе ядра белка.  
PyMOL session



**Рис. 3** Водородная связь ASP93-GLN96 в петле на поверхности глобулы. PyMOL session

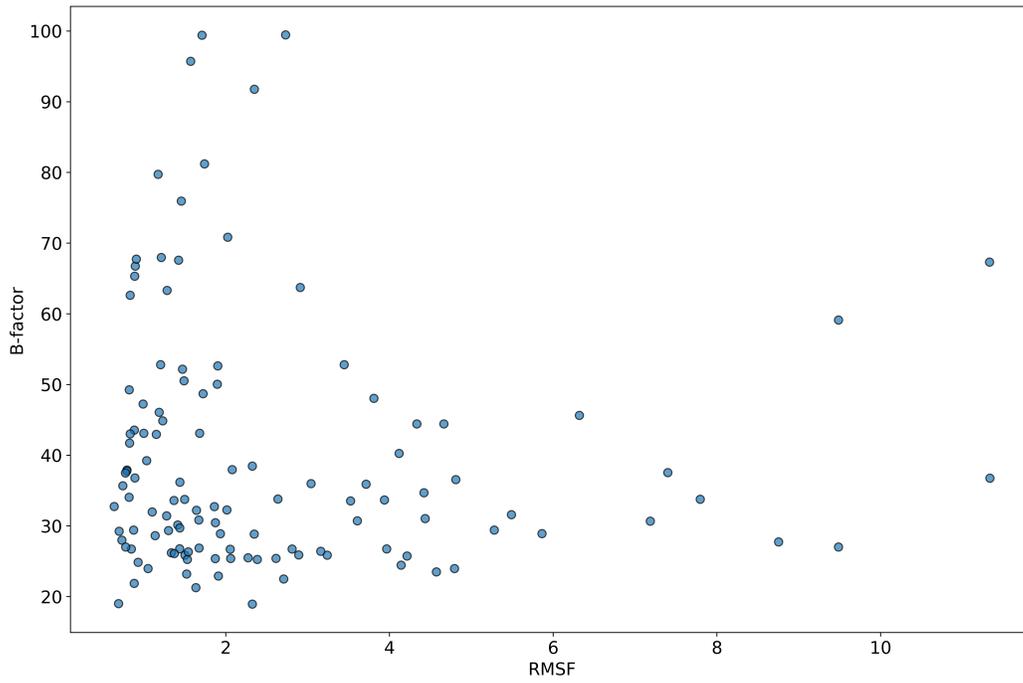
Далее эти же водородные связи рассматривались в структуре, полученной с помощью ЯМР. Для всех моделей структуры были посчитаны длины связей, минимальное, максимальное и медианное расстояние между донором и акцептором связи, а также количество моделей, в которых связь присутствовала. На основании анализа была построена Табл. 1.

Связь	Расстояние в PCA	Число моделей ЯМР со связью	Минимальное расстояние	Максимальное расстояние	Медианное расстояние
ILE104-THR85	3.0	20 (100%)	2.7	2.8	2.75
SER19-THR56	2.5	17 (85%)	2.7	6.3	2.8
ASP93-GLN96	3.2	2 (10%)	3.1	8.4	4.35

Как видно из таблицы, связь в бета-листе сохранялась во всех случаях, между боковыми радикалами внутри глобулы взаимодействие наблюдалась в большинстве моделей, а вот остатки в петле образовывали связь редко, при этом для них сильно больше разброс в длине связи. Скорее всего причина в том, что вторичные структуры глобулы поддерживаются большим числом связей, из-за чего они менее подвижны, причем в большей степени это касается остова, так как боковые радикалы все-таки могут колебаться сильнее. Петли же на краю белка хуже стабилизированы связями и не обладают регулярной структурой, их подвижность больше.

## Задание 2

В этом задании были рассчитаны средние B-факторы остатков в PCA модели и средние RMSF в ЯМР модели. На Рис. 4 изображена зависимость B-фактора от RMSF. Явной корреляции не наблюдается, поэтому можно заключить, что изменение позиций остатков в моделях ЯМР отражает скорее не температурные колебания атомов, а шум в данных.



**Рис. 4** Зависимость среднего В-фактора остатков в PCA модели от среднего RMSF в ЯМР модели