

Задание 1. ЭП: хорошая и плохая расшифровка

В данном задании необходимо было сравнить две кристаллографические расшифровки ([6S2M](#) и [6STS](#)) одного и того же белка - мембранного миелинового белка P2, который участвует в формировании и поддержании миелиновой оболочки.

Структура 6STS содержит две цепи, в отличие от структуры 6S2M. Других значимых различий при рассмотрении выявлено не было. На рис.1 показан результат наложения двух структур друг на друга.

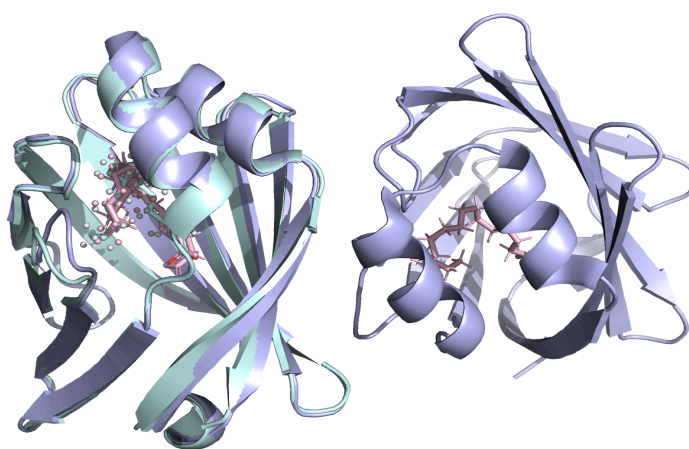


Рис.1. Выравнивание структур 6STS (фиолетовым) и 6S2M (голубым)

Далее были визуализированы электронные плотности для участка структур - α -спирали, образованной остатками с 26 по 36 (рис. 2)

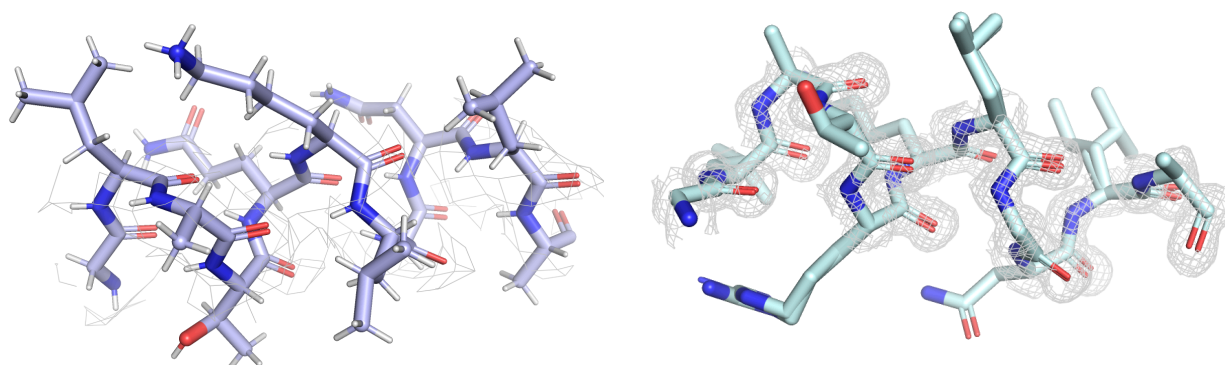


Рис. 2. Электронная плотность для участка 6STS (слева) и 6S2M (справа).
Параметры: уровень подрезки 0.5, carve 1.5 и 1 соответственно

Разрешение структуры 6S2M значительно лучше, электронная плотность располагается равномерно и плотно, сконцентрирована в виде сфер вокруг атомов. В случае 6STS, электронная плотность размазана и покрывает не все участки. Это согласуется с разрешением указанным в pdb: 3.00 Å для структуры 6STS и 0.72 Å для 6S2M. [Ссылка](#) на PyMOL сессию

Задание 2. ЭП и положение в структуре

Для дальнейших заданий использовалась структура [4KFQ](#) - глутамат связывающий домен NMDA рецептора. Сначала необходимо было оценить электронную плотность белкового остова на разных уровнях подрезки (1, 2, 3).

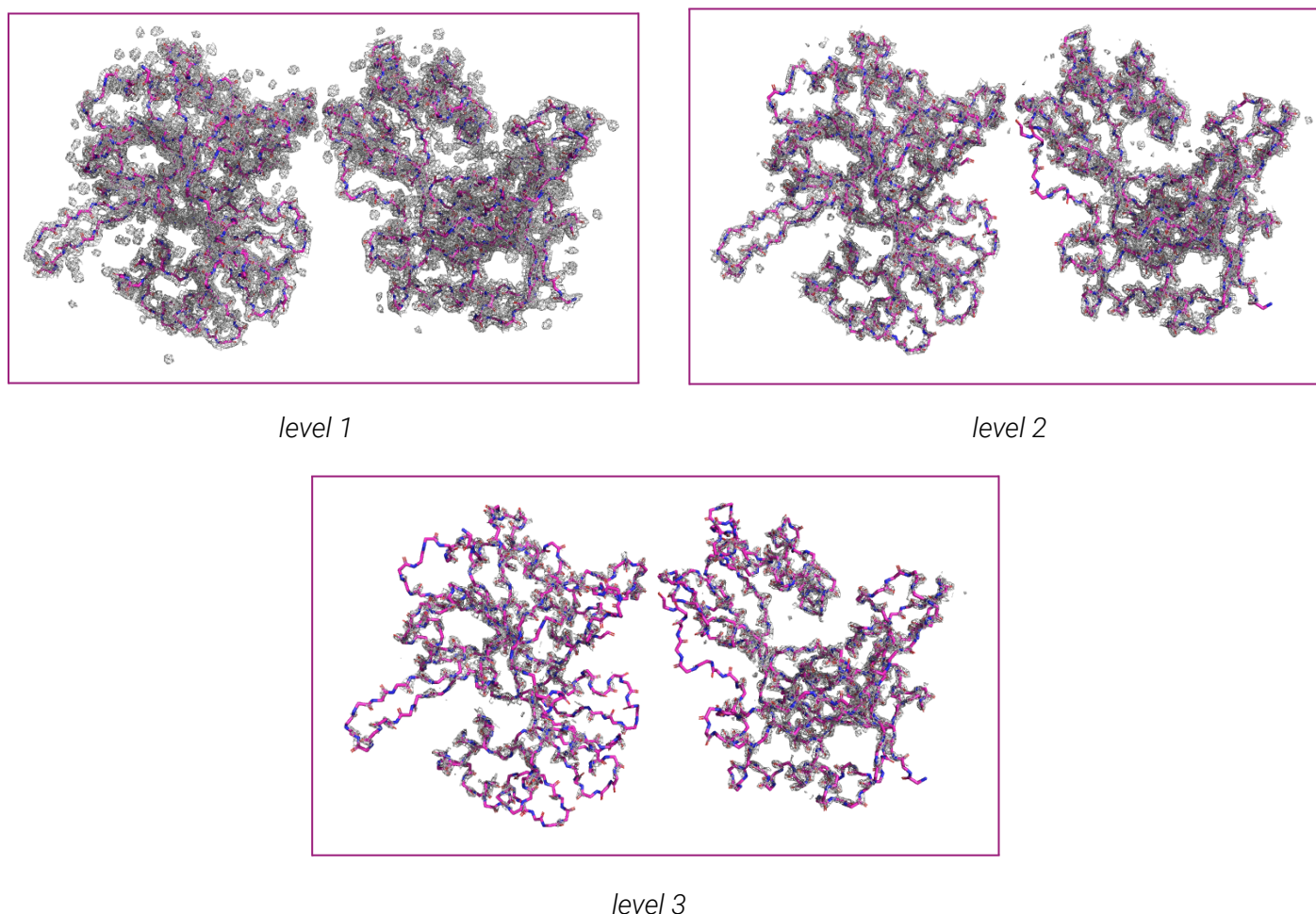


Рис. 3. Электронная плотность структуры 4KFQ на разных уровнях подрезки, $carve=1.5$

Можно заметить, что с увеличением уровня подрезки, участки белка, более удаленные от других, перестают быть покрытыми электронной плотностью. Это может быть связано с тем, что на них оказывается меньшее влияние со

стороны электронных оболочек других молекул, а также с тем, что эти части белка более подвижны. [Ссылка](#) на PyMOL сессию

Задание 3. ЭП и типы атомов

Лигандом, рассмотренной выше структуры, является органическое соединение, содержащее хиноксалиновое и тиазольное кольца, а также SH группу.

Была визуализирована электронная плотность с разными уровнями подрезки - 1, 2 и 3.

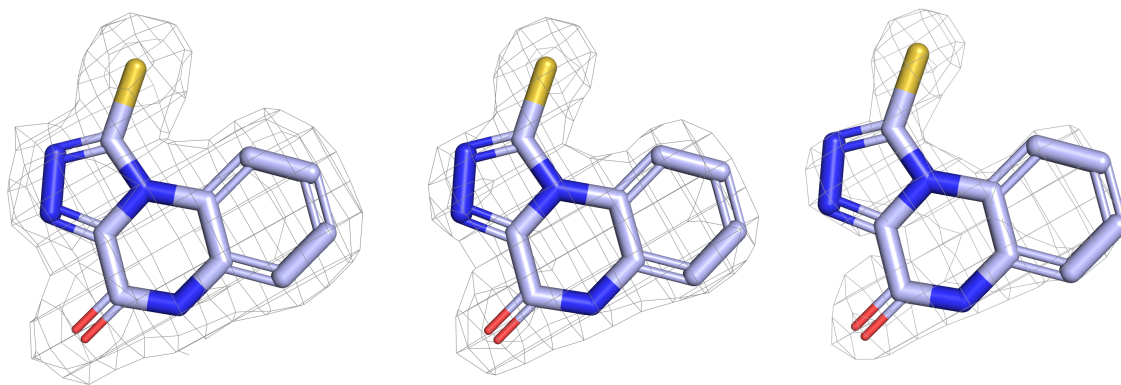


Рис. 4. Электронная плотность лиганда на уровнях подрезки от 1 до 3 (слева направо), $carve=1.5$

Видно, что при повышении уровня подрезки уменьшается степень покрытия лиганда электронной плотностью. Наибольшей электронной плотностью характеризуются электроотрицательные атомы - кислород и сера. В ароматических системах электронная плотность сохраняется, но в меньшей степени. [Ссылка](#) на PyMOL сессию.