

Задание 1. Альтернативные положения

В рамках данного практикума я буду работать со структурой бета-лактамазной пенициллиназы из *Vacillus megaterium* (PDB ID - [6MU9](#)). Этот фермент способен разрушать структуру пенициллина, формируя у бактерии резистентность к антибиотику.

В первом задании необходимо было изучить альтернативные конформации аминокислотных остатков – His-195 и Arg-181, и определить наиболее стабильные сочетания. Результаты представлены на рисунках 1-4.

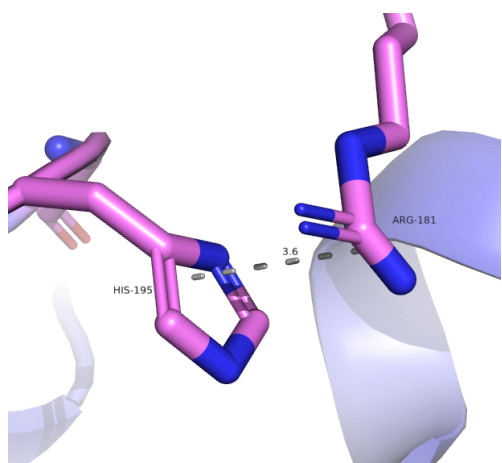


Рис. 1. His-195(A) – Arg-181(A)

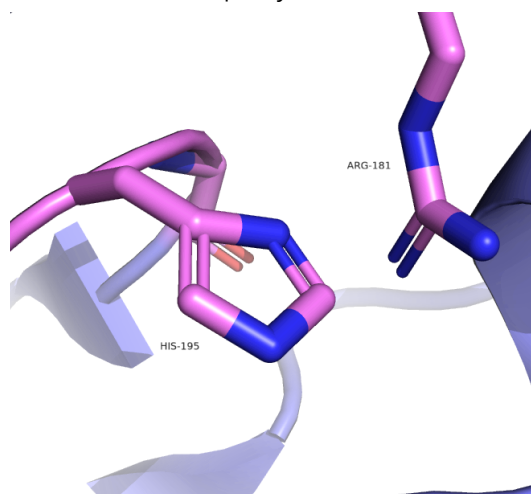


Рис. 2. His-195(A) – Arg-181(B)

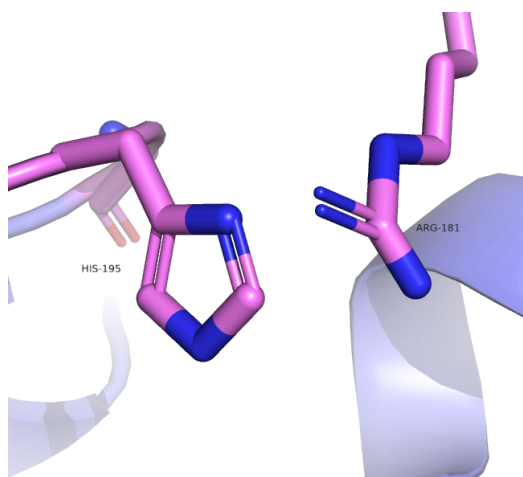


Рис. 3. His-195(B) – Arg-181(A)

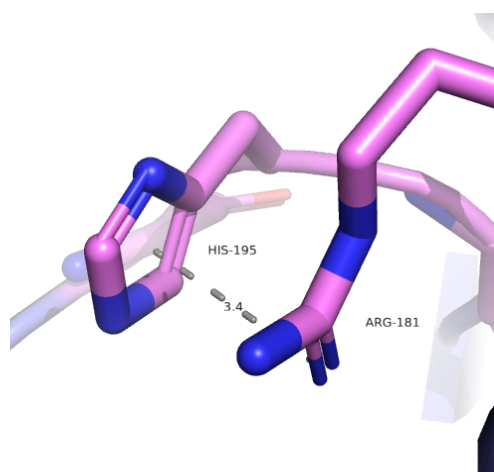


Рис. 4. His-195(B) – Arg-181(B)

Конформации А-А и В-В возможны, так как они стабилизируются за счет пи-катионного стекинга между положительно заряженной аминогруппой аргинина и ароматической системой гистидина. В сочетаниях А-В и В-А такое взаимодействие затруднено, и стабильными они не будут. Населенность для альт-лока А в обоих случаях равна 0.6, а для альт-лока В – 0.4 Таким образом, наиболее вероятными является вариант А-А. Ссылка на [сессию](#).

Задание 2. B-фактор

B-фактор отражает насколько размазана электронная плотность вокруг атома. Низкое значение указывает на фиксированное положение атома, а высокое на его подвижность. Можно наблюдать, что практически все атомы белка имеют низкий B-фактор, но при переходе к периферии значение B-фактора увеличивается, что объясняется подвижностью этих остатков.

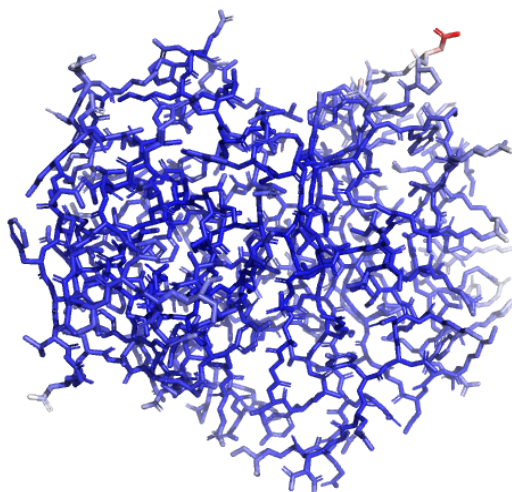


Рис. 5. Остов белка, покрашенный по B-фактору

Более детально рассмотрим остаток с высоким значением B-фактора на разных уровнях подрезки. С увеличением уровня подрезки участок перестает быть покрытым электронной плотностью. При этом на красном участке (наиболее высокое значение B-фактора) она пропадает в первую очередь.

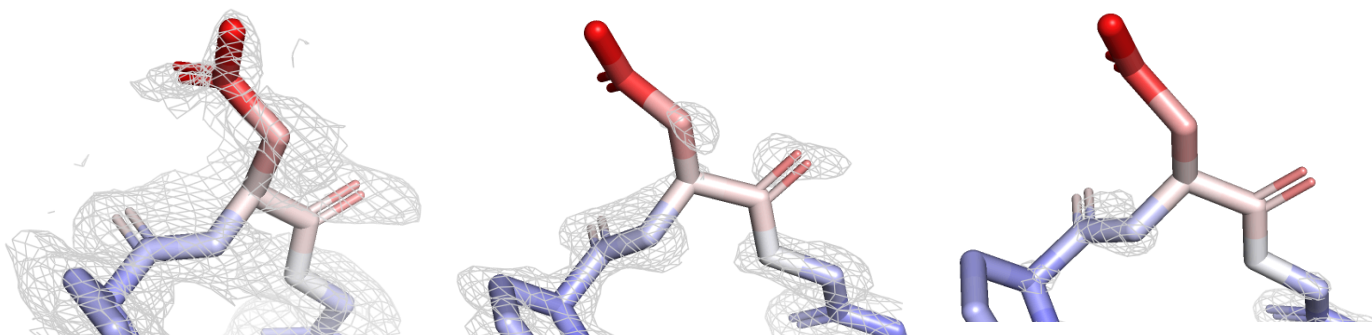


Рис. 6. Остаток аспарагина, покрашенный по B-фактору. Уровень подрезки слева направо 0.5, 1 и 2.

Ссылка на [сессию](#).

Задание 3. Соседи

Далее была рассмотрена структура кристалла (уровень подсечки 12Å) и визуализированы соседи белка по кристаллу – их оказалось 10, использованный уровень подсечки 5 Å.

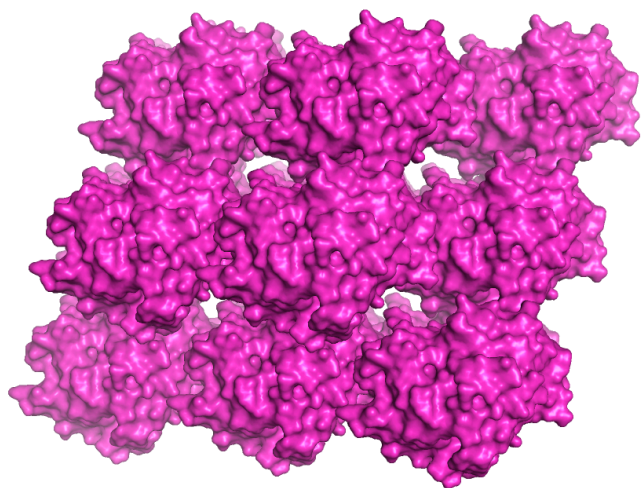


Рис. 7. Структура кристалла

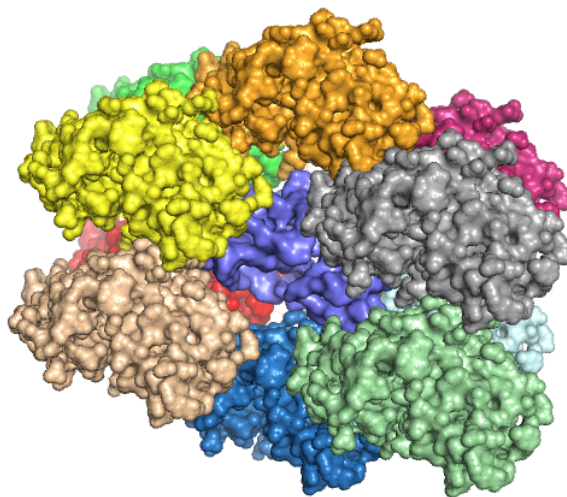


Рис. 8 Соседи изучаемого белка
(показан фиолетовым цветом)

Ссылка на [сессию](#).