

Задание В1. Helices

Для выполнения данного задания были предоставлены три последовательности: seqA, seqB и seqC.

```
GSHMASLDMAEIKEKICDYLFNVSDSSALNLAKNIGLTKARDINAVLIDMERQGDVYRQGTTPPIWHLTDKKRERMQIK  
GSHMASLDMAEIPPPPCDYLFNVSDSSALNLAKNIGLTKARDINAVLIDMERQGDVYRQGTTPPIWHLTDKKRERMQIK  
GSHMAPPPPPPPPPPPPPPPPSDSSALNLAKNIGLTKARDINAVLIDMERQGDVYRQGTTPPIWHLTDKKRERMQIK
```

Можно заметить, что в начале последовательности seqB появляется вставка из нескольких пролинов. В seqC количество пролинов возрастает до 18.

Такая вставка может нарушить образование альфа-спирали, так как в пролине атом азота входит в состав жесткого кольца, и вращение вокруг связи N-C невозможно. Также возможно появления особой структуры - полипролиновой спирали.

С помощью AlphaFold были предсказаны структуры данных белков. Для начала рассмотрим предсказание для seqA.

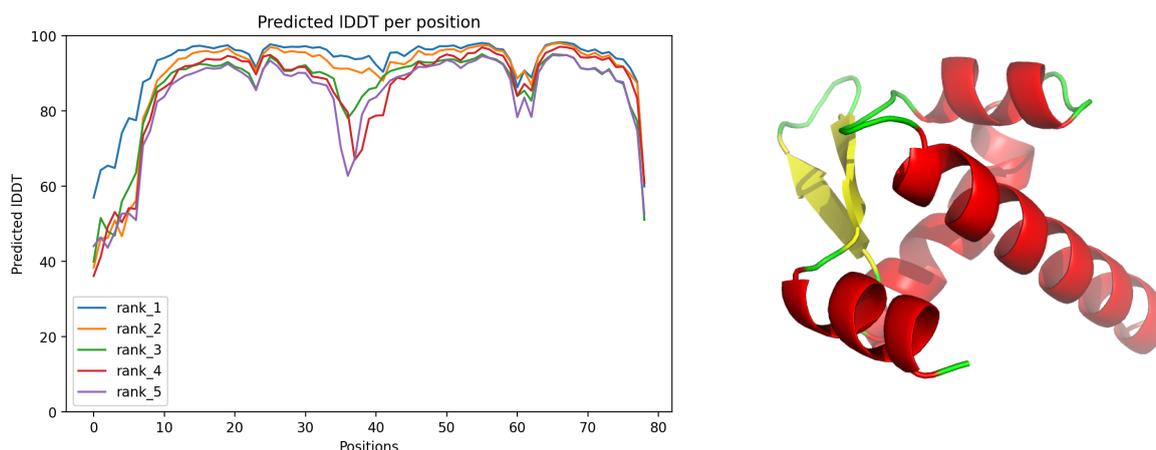
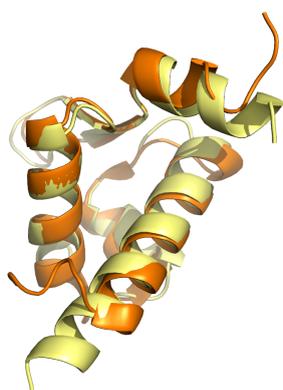


Рис. 1. Результаты предсказания для seqA

Качество предсказания приемлемое, для визуализации была выбрана модель rank_1 - с наибольшим правдоподобием.



Также, с помощью blastp было выяснено, что данная последовательность соответствует А-цепи РНК-специфичной аденозиндезаминазы. Структура в PDB - [1XMK](#). Выравнивание этих двух структур показало незначительные отличия.

Рис. 2. Выравнивание seqA и 1xmk

Далее была предсказана структура для seqB:

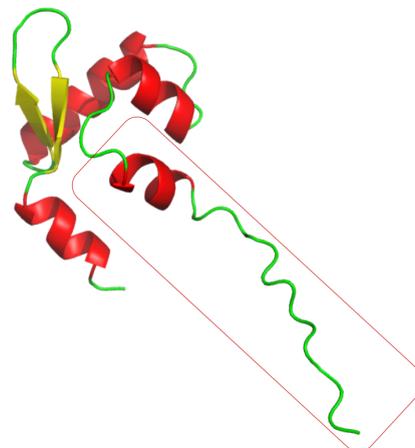
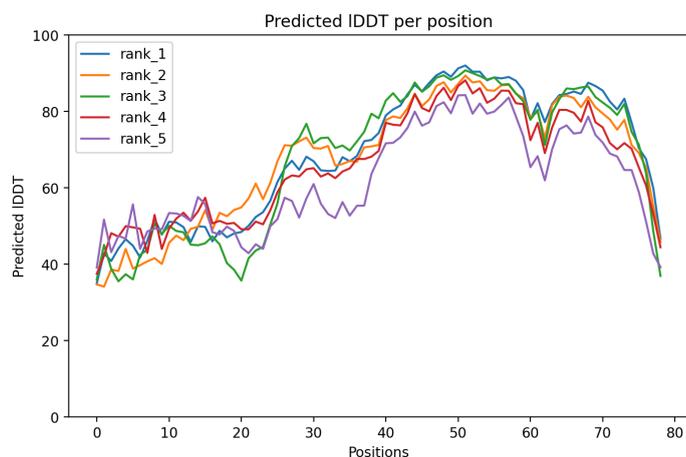
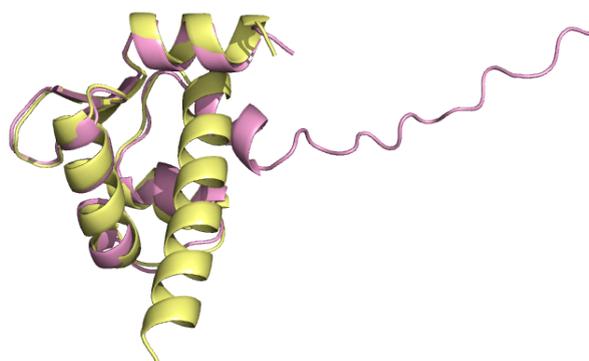


Рис. 3. Предсказание для seqB. Красным прямоугольником обозначен участок с невысоким качеством.



Пролиновая вставка действительно сделала невозможным существование альфа-спирали. Так как эта часть последовательности не организована в стабильную структуру, качество предсказания на этом участке не очень высокое.

Рис. 4. Выравнивание seqA и seqB

Для структуры seqC были получены следующие результаты:

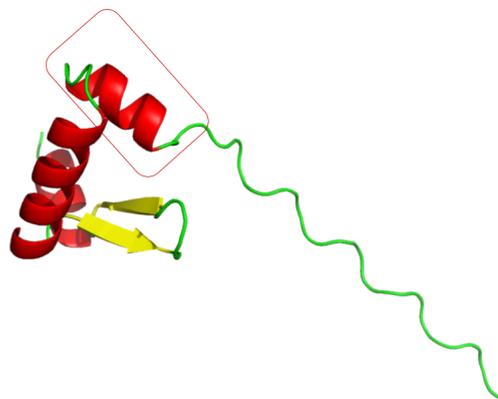
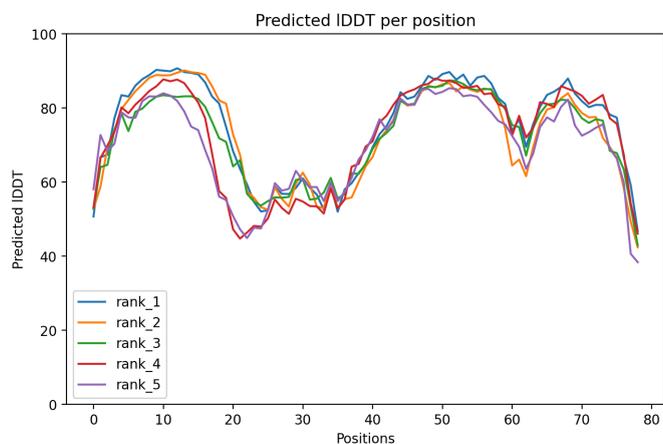


Рис. 5. Результаты AlphaFold для seqC. Красным прямоугольником обозначен участок с невысоким качеством.

В данном случае образуется полипролиновая спираль, и этот участок имеет высокий уровень качества. Однако, качество проседает на небольшом участке альфа-спирали, который следует после полипролиновой спирали.

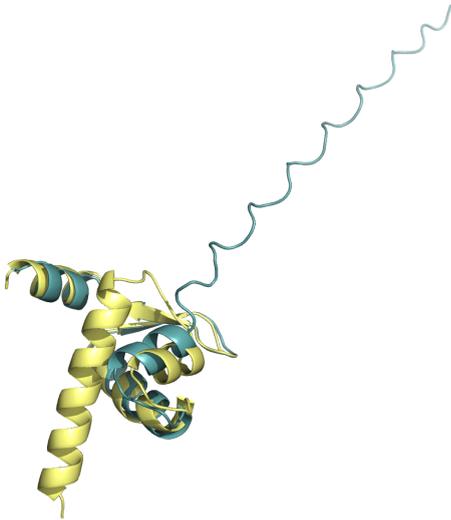


Рис. 6. Выравнивание seqA и seqC

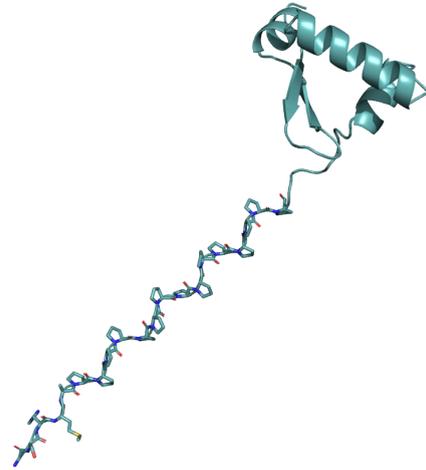


Рис. 7. Полипролиновая спираль seqC

Ссылка на PyMol [сессию](#).