

Задание 1. Протонирование

В рамках данного практикума я буду работать с С-концевым доменом белка SspB организма *Streptococcus gordonii* (PDB ID - [7L00](#)). Данный белок относится к семейству адгезинов. С-концевой участок прикрепляется к гликопротеину, тем самым участвуя в адгезии бактерии к поверхности зубов.

Структура была получена при pH 4. Для протонирования использовался алгоритм PROPKA.. Были выбраны остатки Asp и Glu с наиболее высокими значениями pKa.

Asp 1110 с pKa 7.89

Рассмотрим остаток аспартата. В протонированном состоянии боковой радикал способен формировать водородные связи с карбоксильной группой аспартата 1112 или с атомом кислорода тирозина 1077. Если остаток непротонирован, возможна водородная связь с лизином 1079 (на рисунке обозначена зеленым цветом)

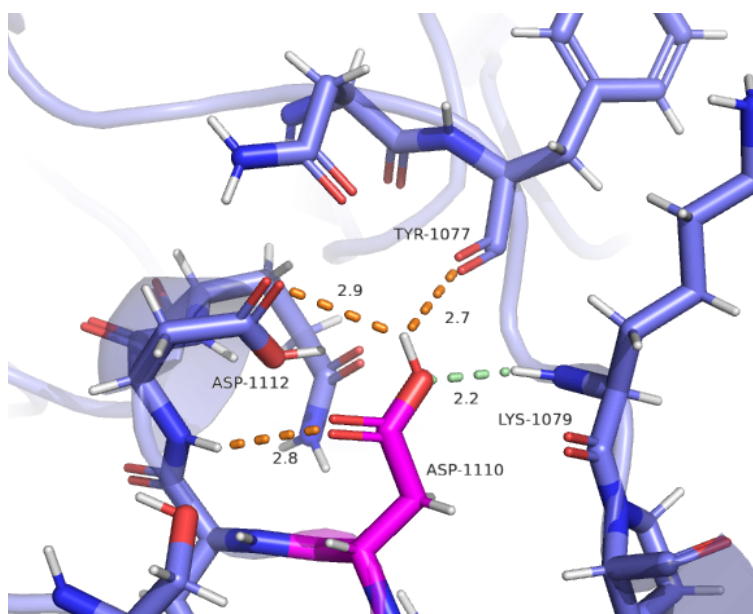


Рис.1. Asp 1110 В цепи и его окружение

В целом мне кажется, что PROPKA права с фактом протонирования и местонахождением протона.

Asp 1307 с pKa 7.44

Далее был рассмотрен еще один остаток аспартата. Положение, в котором находится протон, кажется не очень реалистичным, так как взаимодействия в таком случае затруднительны. Он может быть повернут в сторону аспарагина 1393, формируя водородную связь с его радикалом. Или в сторону треонина 1394, формируя водородную связь с атомом кислорода пептидной связи. Однако, вполне вероятно, что остаток протонированным не является, выступая тогда акцептором водородной связи с радикалом аспарагина 1393 (показано зеленым цветом).

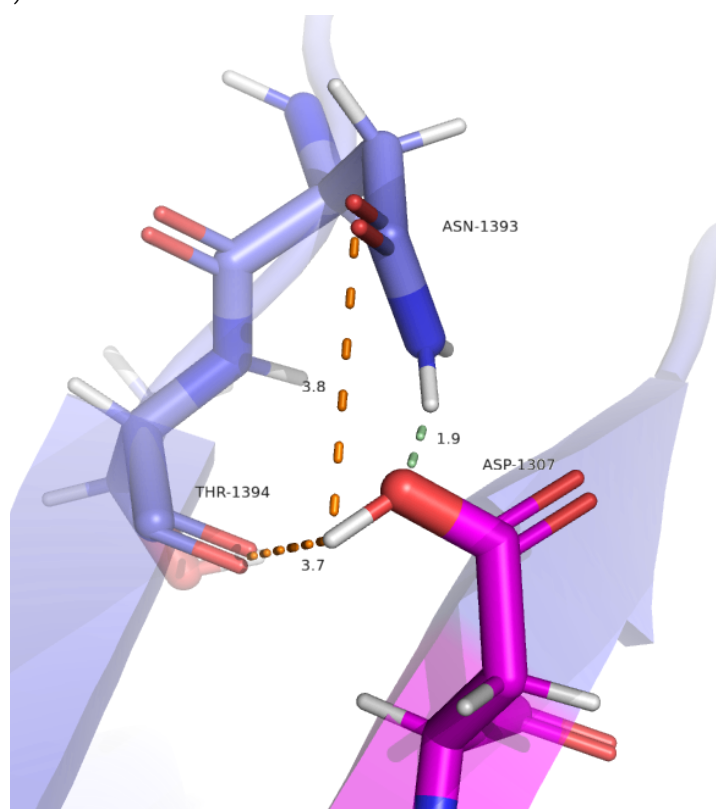


Рис.2. Asp 1307 В цепи и его окружение

Glu 1298 с pKa 7.51

Также был рассмотрен остаток глутамата. В данном случае возможно несколько вариантов:

- остаток протонирован, но это не приводит к образованию новых взаимодействий
- остаток протонирован, но протона у серина нет, и водород глутамата повернут к нему. Образуется водородная связь
- программа ошиблась с наличием протона

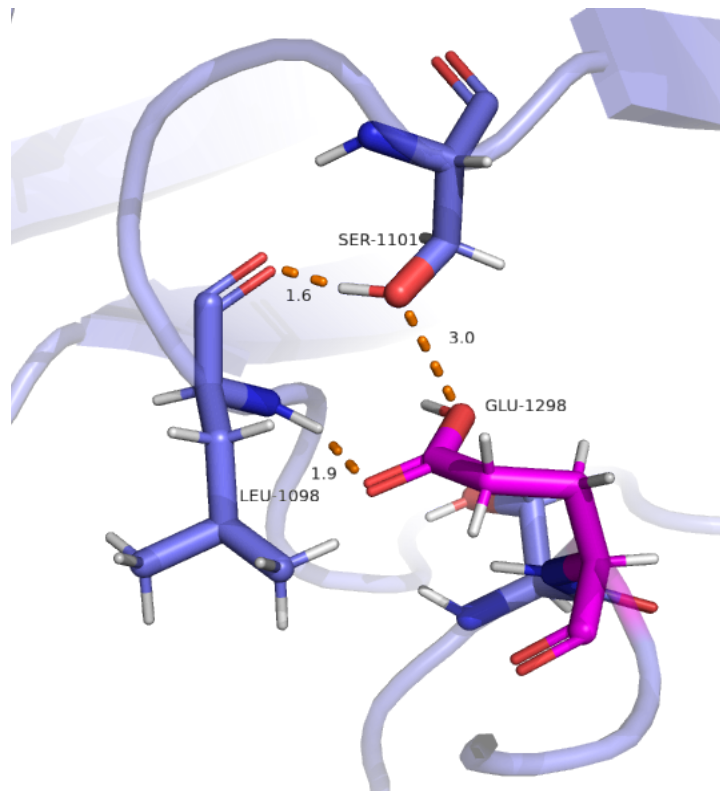


Рис.3. Glu 1298 A цепи и его окружение

Думаю, наиболее реалистичным является последний вариант.
Ссылка на [сессию](#).