

Задание 1

В рамках данного практикума я буду работать со структурами полученными методами РСА и ЯМР для белка MS3494 (PDB IDS: [7REF](#) - РСА, [7S0N](#) - ЯМР). Данный белок участвует в секреции сидерофоров - соединений, хелатирующих ионы железа из окружающей среды, которые в дальнейшем будут усвоены микроорганизмом. В данном случае бактерией *Mycobacterium smegmatis*.

В структуре, полученной методом РСА, были выбраны три водородные связи:

Между атомами остова в альфа-спирали внутри глобулы

Донор - Ala58(27), N

Акцептор - Ile54(23), O

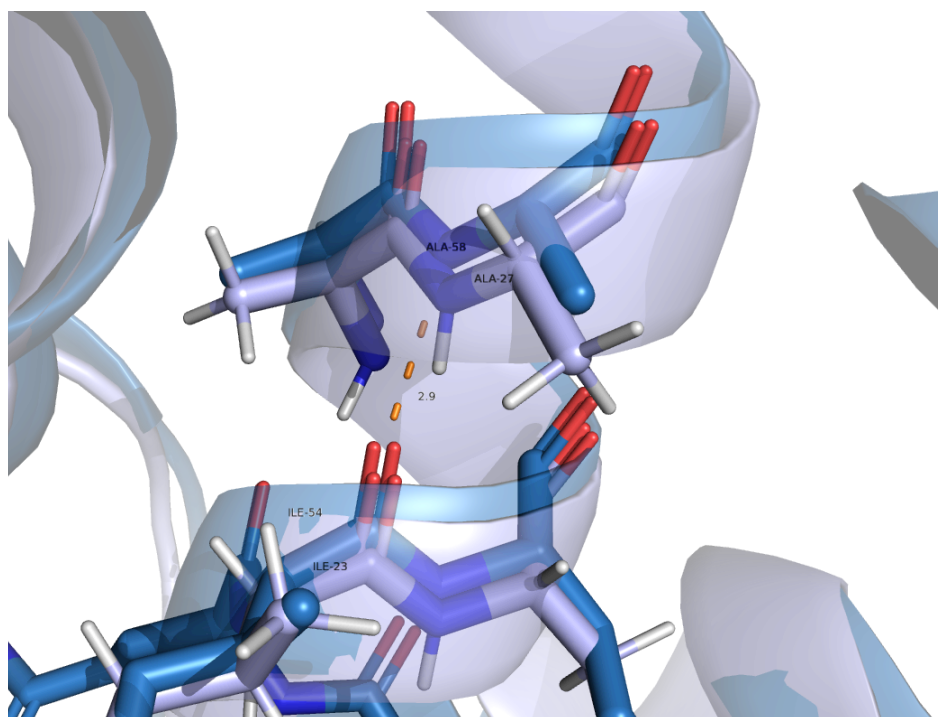


Рис.1. Водородная связь Ala-58, Ile-54. Синим показана структура, полученная методом РСА. Фиолетовым - полученная методом ЯМР

Между атомами остова и бокового радикала внутри глобулы

Донор - Tyr69(38), OH

Акцептор - Trp122(91), O

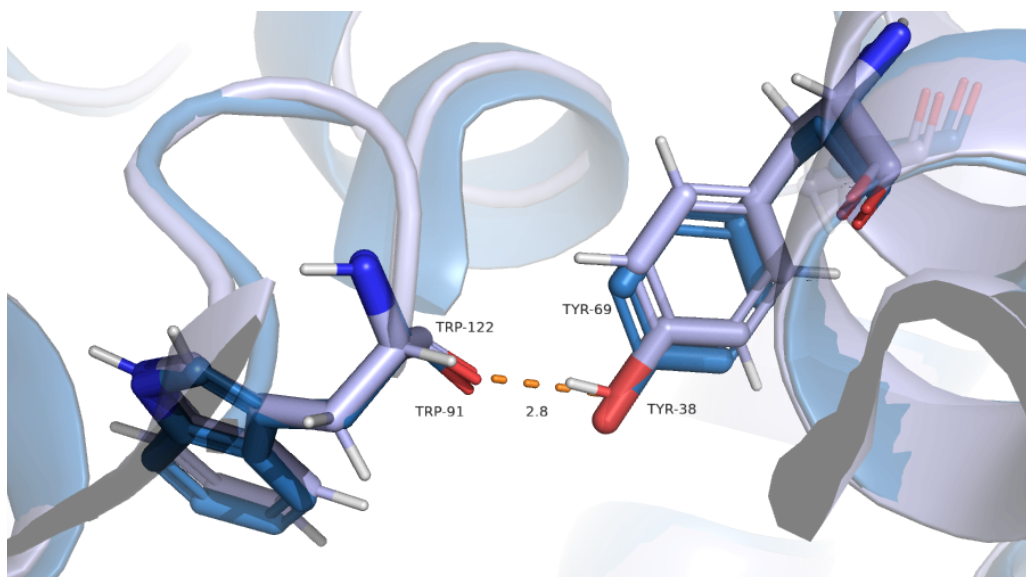


Рис.2. Водородная связь Tyr69, Trp122. Синим показана структура, полученная методом РСА. Фиолетовым - полученная методом ЯМР

Между боковыми радикалами на поверхности глобулы

Донор - Thr137(106), OG1

Акцептор - Arg43(12), NH2

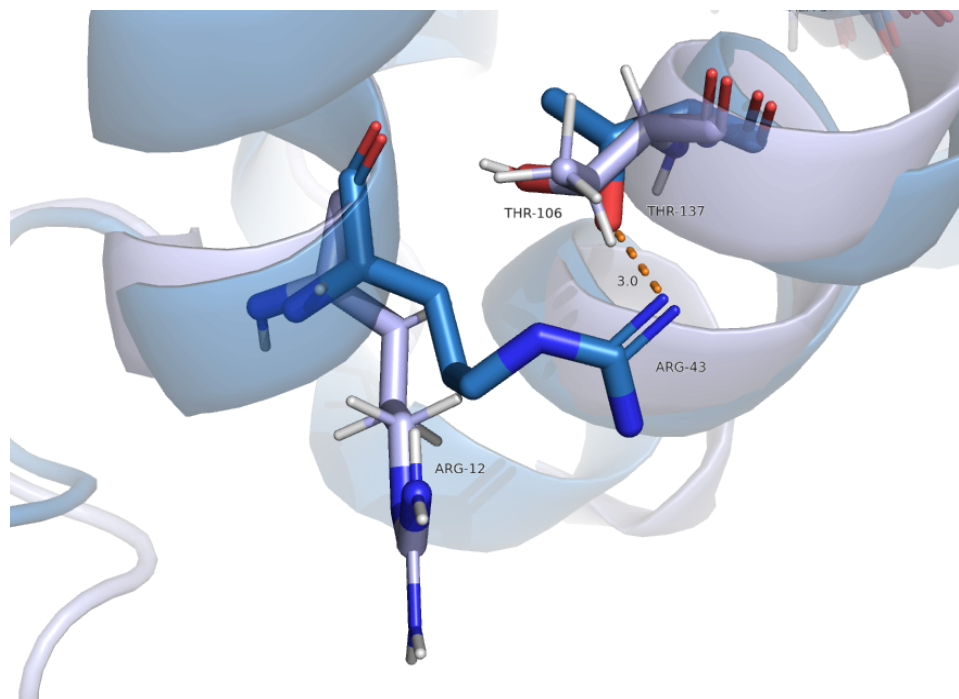


Рис.3. Водородная связь Arg43, Thr137. Синим показана структура, полученная методом РСА. Фиолетовым - полученная методом ЯМР

Далее было рассчитано расстояние между атомами, образующими водородные связи и определено, в каком числе ЯМР моделей присутствуют данные связи:

Табл. 1. Характеристика водородных связей

Расположение	Донор	Акцептор	Расстояние в PCA, Å	Доля моделей ЯМР	Расстояние в ЯМР, median, Å	Расстояние в ЯМР, min, Å	Расстояние в ЯМР, max, Å
между атомами остова в альфа-спирали внутри глобулы	Ala58(27), N	Ile54(23), O	2.9	100% (10 из 10)	2.7	2.6	2.7
между атомами остова и бокового радикала внутри глобулы	Tyr69(38), OH	Trp122(91), O	2.8	100% (10 из 10)	2.7	2.6	2.8
между боковыми радикалами на поверхности глобулы	Thr137(106), OG1	Arg43(12), NH2	3	10% (1 из 10)	8.43	3.26	8.74

Аминокислоты внутри глобулы стабилизируются большим количеством взаимодействий. Водородные связи между такими аминокислотами устойчивы и сохраняются для всех ЯМР структур. Для водородной связи на поверхности глобулы это не характерно. Она сохраняется только в одной ЯМР структуре, расстояния между атомами в разных моделях варьируется.

Ссылка на [сессию](#)

Ссылка на [colab](#) (1 и 2 задания)

Задание 2

В этом задании необходимо было проверить, соотносятся ли значения подвижности аминокислотных остатков молекулы по результатам ЯМР, с величинами B-факторов, полученными в PCA эксперименте.

Для расчета значений RMSF и значений B-факторов был использован пакет ProDy. PCA модель содержала две цепи, для сравнения была использована только цепь A. В срез не вошли 5 C-концевых остатков, которых нет в последовательности структуры ЯМР.

Полученный скаттер-плот:

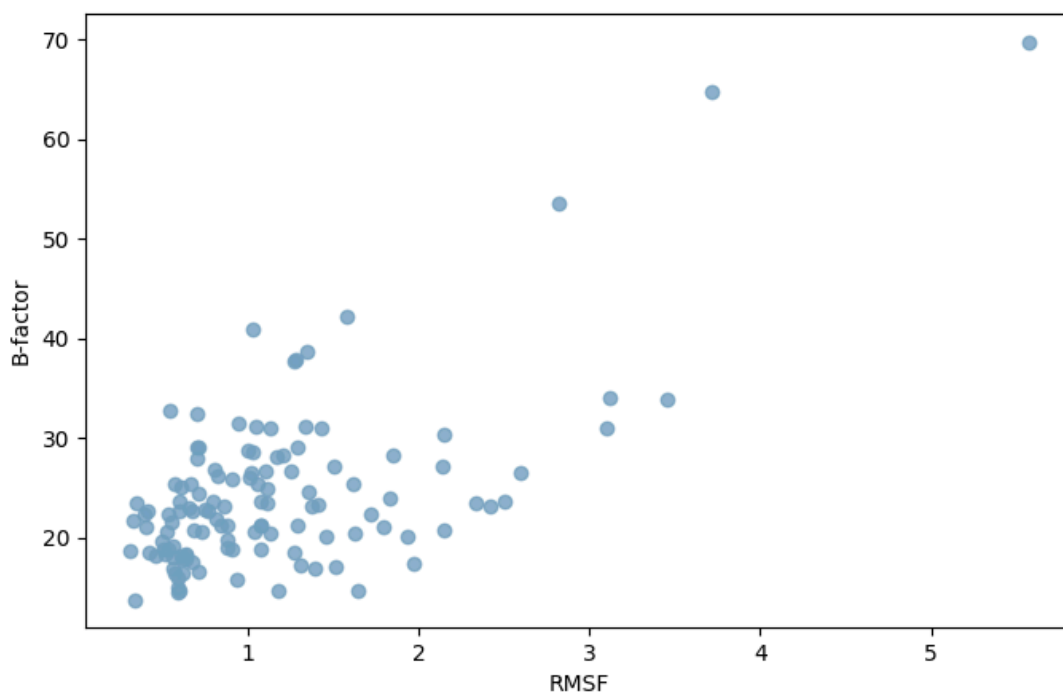


Рис.4. График зависимости значений B-фактора от RMSF

В целом на графике заметна положительная корреляция, хоть и не очень устойчивая. Коэффициент корреляции Пирсона равен 0.64 ($pvalue=2.7 \cdot 10^{-15}$). Значит, в данном случае ансамбль моделей ЯМР можно принять за отражение подвижности белка.