

Задание 1

В данном задании необходимо было определить границы доменов для А цепи белка бактериальной сиалидазы (PDB ID - [2BZD](#)), фермента, ответственного за высвобождение сиаловой кислоты из различных гликоконъюгатов. В литературе сообщается о трех доменах [1]:

- 47-403 - каталитический домен (на рисунке показан розовым)
- 403-505 - иммуноглобулин подобный домен (фиолетовый)
- 505-647 - СВМ домен для связывания с лактозой (голубой)

Для разбиения структуры на домены использовался алгоритм DOMAK. Ссылка на [colab](#). Было найдено три домена - 47-402, 403-502, 503-647. Границы были показаны на структуре. Ссылка на [сессию](#).

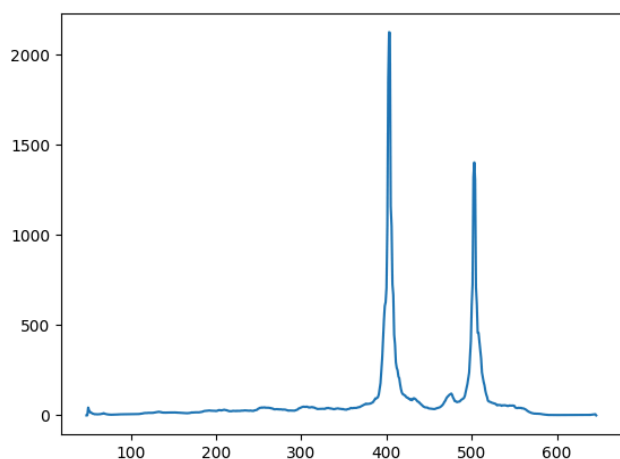


Рис. 1. Границы доменов DOMAK

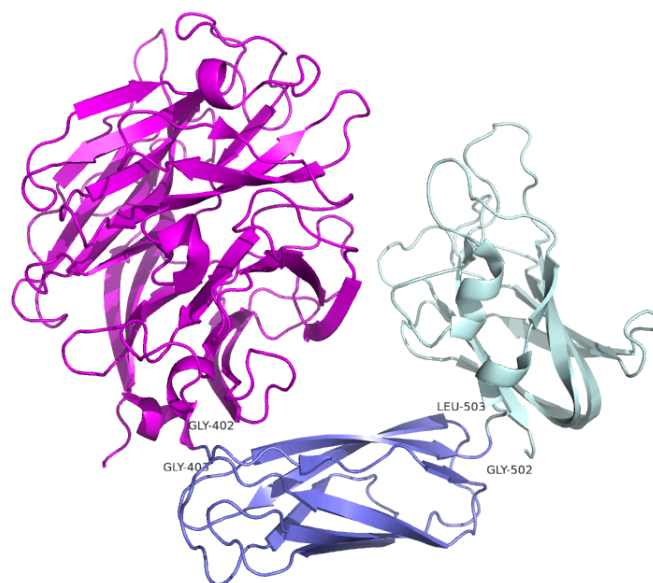


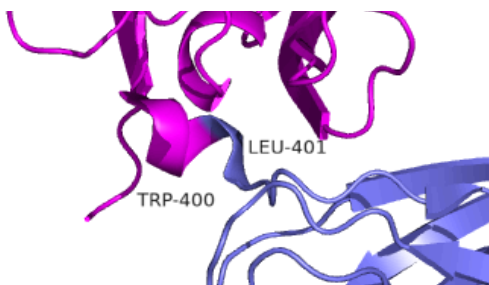
Рис. 2. Границы доменов DOMAK на структуре

Задание 2

Далее исследуемый белок был найден в базе данных CATH. Там также содержится информация о трех доменах:

Domain	Start	Stop	Length
2bzdA01	47	400	353
2bzdA02	401	502	101
2bzdA03	503	647	144

Рис.3. Домены в CATH



Вторая граница совпадает с выдачей ДОМАК. Первая граница смещена на два аминокислотных остатка и заходит на альфа-спираль.

Рис. 4. Граница между первым и вторым доменом

В Базе данных SCOP белок 2BZD найти не удалось, но был предложен наиболее близкий - 1W8O. Для него было также выделено три домена (47-402, 403-505, 506-647). Видно, что вторая граница отличается на 3 аминокислотных остатка.

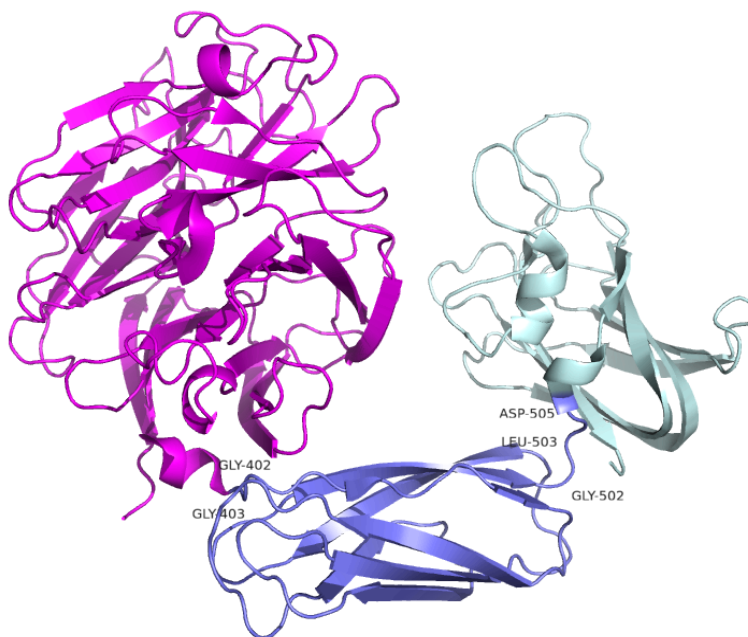


Рис.5. Доменная организация согласно SCOP

Задание 3

Далее поиском по последовательности в Interpro были найдены эволюционные домены. Их границы отличаются от того, что мы видели раньше, но функция совпадает с описанной в литературе [1]

- сиалидазный домен 54 - 397
- иммуноглобулин - подобный участок 416 - 487
- галактозо-связывающий домен 496 - 646

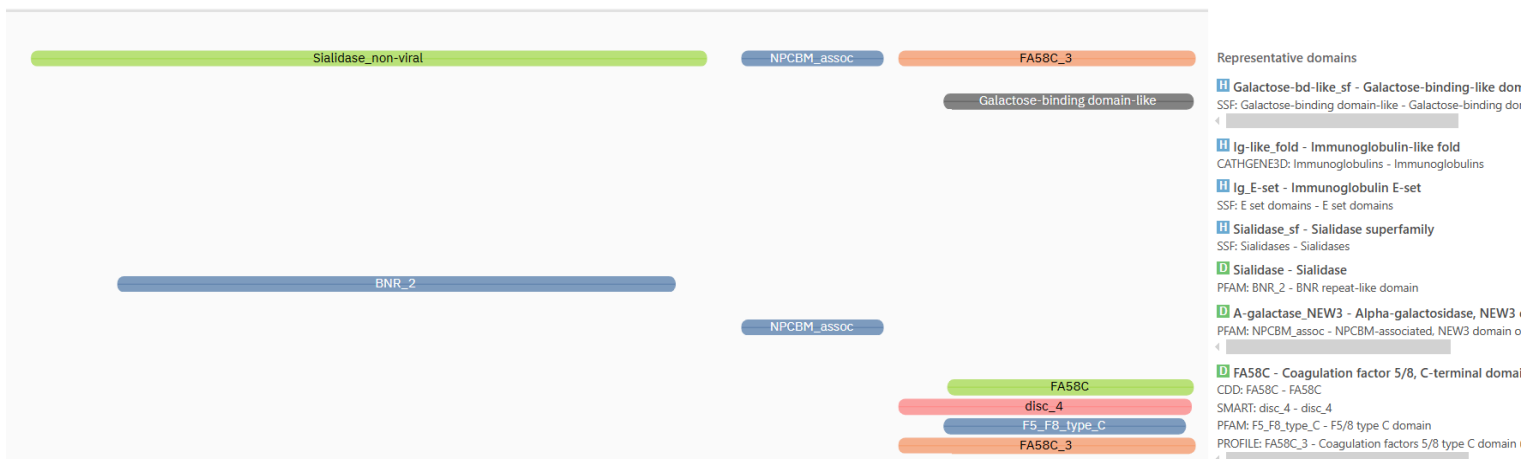


Рис.6. Выдача Interpro

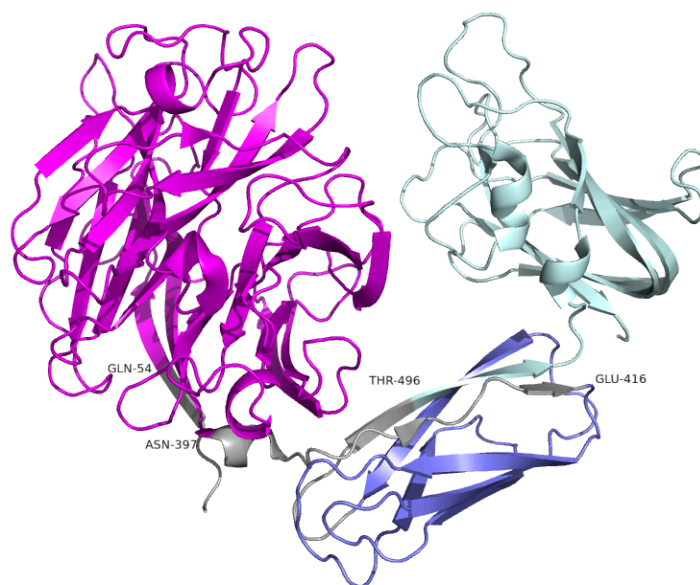


Рис.7. Домены согласно Interpro. Серым показаны не включенные в домены области

Таблица 1. Границы доменов по разным источникам

	домен 1	домен 2	домен 3
DOMAK	47 - 402	403 - 502	503 - 647
SCOP	47 - 402	403 - 505	506 - 647
CATH	47 - 400	401 - 502	503 - 647
InterPro	54 - 397	416 - 487	496 - 646

В целом границы доменов похожи. Наиболее вероятной, исходя из структуры, мне показалась разметка DOMAK.

Список литературы

[1] Newstead, S. L., Watson, J. N., Bennet, A. J., & Taylor, G. (2005). Galactose recognition by the carbohydrate-binding module of a bacterial sialidase. In *Acta Crystallographica Section D Biological Crystallography* (Vol. 61, Issue 11, pp. 1483–1491). International Union of Crystallography (IUCr).
<https://doi.org/10.1107/s0907444905026132>