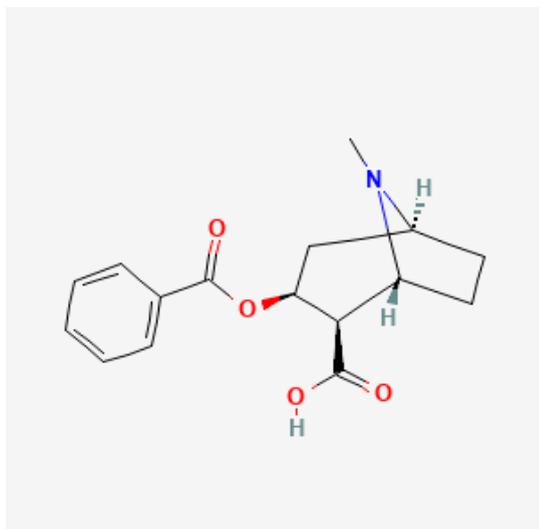


Введение



В данном практикуме были рассмотрены взаимодействия антитела к кокаину (не является пропагандой) с бензоилэкгонином - основным метаболитом кокаина. Это антитело используется в целях медицинской диагностики содержания данного вещества в сыворотке крови человека [1].

PDBID: [1qyg](#)

Рис. 1. Бензоилэкгонин (BCG)

Задание 1. Взаимодействие лиганда с белком

С использованием программы PyMOL было визуализировано взаимодействие белка с лигандом:

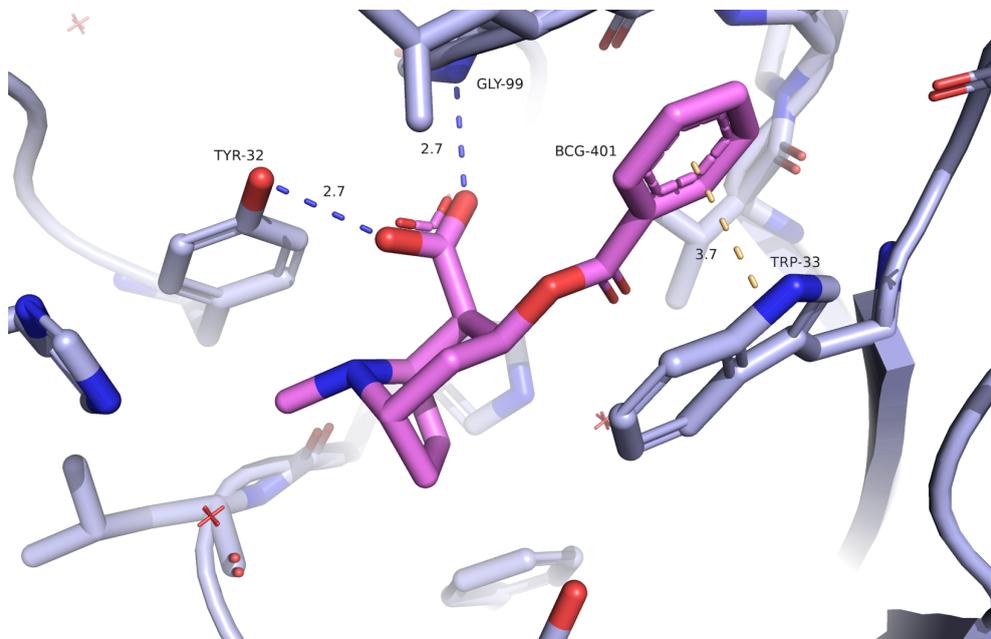


Рис. 2. Изображение лиганда BCG с аминокислотными остатками в радиусе 4Å. Желтой пунктирной линией показано стэкинг-взаимодействие, фиолетовыми - водородные связи.

Были обнаружены:

1. Стэкинг-взаимодействие между бензольным кольцом VCG и индольным кольцом триптофана
2. Водородная связь между карбоксильной группой VCG и гидроксильной группой тирозина, и между той же карбоксильной группой и аминогруппой глицина, включенной в пептидную связь

Также в сайте связывания много молекул воды, можно предположить взаимодействие аминокислотных остатков с лигандом через водородные связи с водой.

[Ссылка](#) на PyMOL сессию.

Задание 2. Электронная плотность

В рамках данного задания была скачана карта электронной плотности $2\text{f}\sigma\text{c}$, визуализирована в виде mesh с подрезкой 1 и carve равное 2.

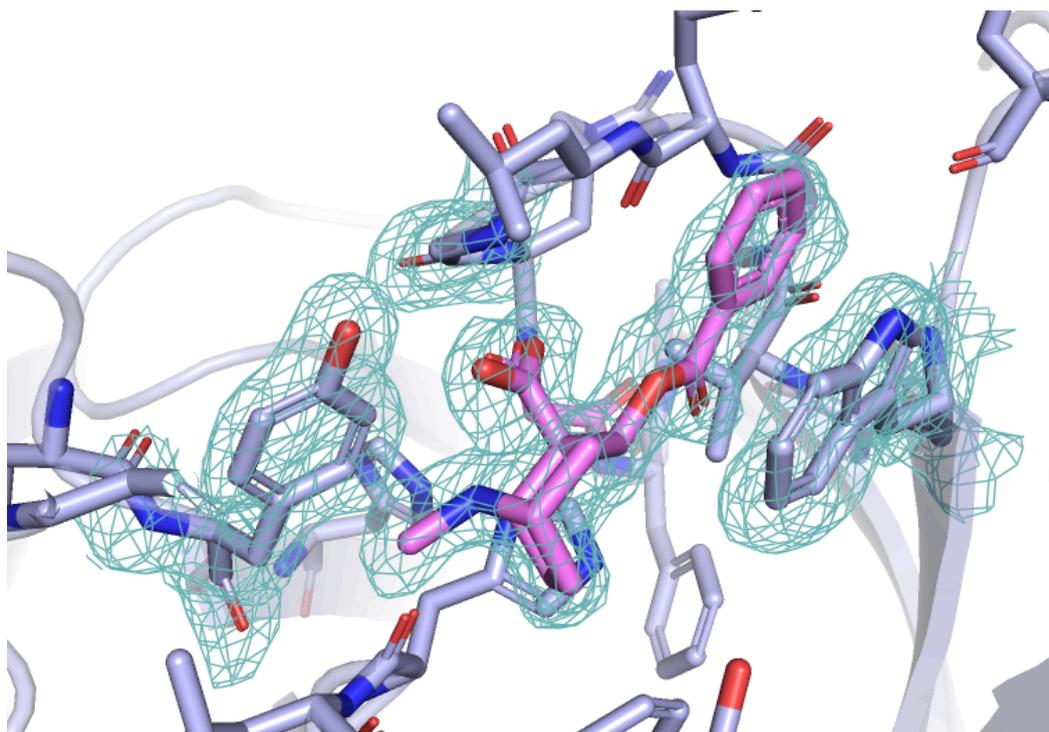


Рис. 2. Визуализация электронной плотности в виде mesh в районе лиганда и окружающих его аминокислотных остатков

И лиганд и аминокислотные остатки одинаково хорошо покрыты электронной плотностью.

[Ссылка](#) на PyMOL сессию.

Список литературы

1. Edwin Pozharski, Aaron Moulin, Anura Hewagama, Armen B. Shanafelt, Gregory A. Petsko, Dagmar Ringe, Diversity in Hapten Recognition: Structural Study of an Anti-cocaine Antibody M82G2, <https://doi.org/10.1016/j.jmb.2005.03.080>.