

Практикум 8. Разметка вторичной структуры

Задание 1. Знакомство с укладками

В этом задании было получено изображение наложения 10 структур, имеющих не более 40% попарного сходства по последовательностям. Посмотрим на рис.1.



Рис.1. Выравнивание 10 структур с разных ракурсов.

В целом, третичная укладка для этих структур похожа: накладываются, хоть и неидеально, бета-листы и альфа-спирали. Некоторые петли имеют вполне похожее пространственное положение, но некоторые сильно различаются. Кроме того, есть участки, которые для некоторых структур (например, розовой 1h9oA00 и голубой 3mazA00) размечены как куски альфа-спираль, а для остальных как петли.

Задание 2. Работа с разметкой вторичной структуры в ручном режиме

Рассмотрим участок в 1d4tA00 Gly 62 – Ala 66, который определяется Pymol как бета-лист, в 1h9oA00 участок в том же месте пространства тоже определяется как бета-лист, но менее короткий - с Gly 66 по Gly 68 (рис. 2). Вторичная структура в Pymol определяется автоматически с помощью алгоритма dssp.

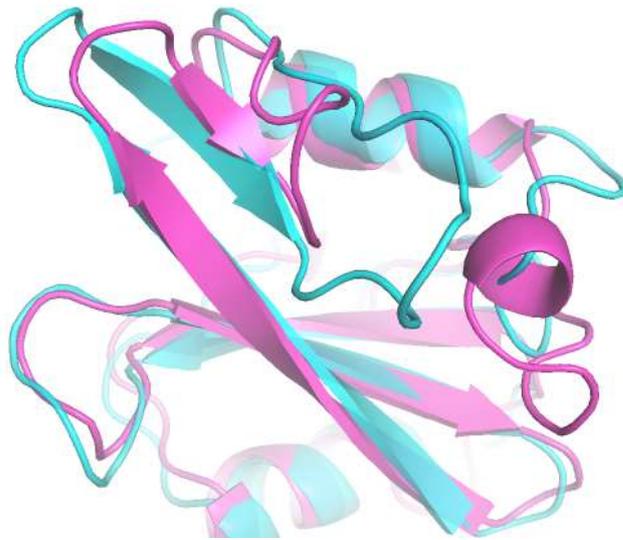


Рис.2. Участок структуры 1d4tA00 (голубым цветом) и 1h9oA00 (розовым цветом), содержащий более короткий бета-лист.

При более детальном рассмотрении структуры 1d4tA00 (рис.3) видно, что алгоритм dssp упустил одну водородную связь глицина 62 (отмечена красным) и продлил разметку бета-листа на аланин 66, у которого нет подходящих водородных связей для образования данной вторичной структуры.

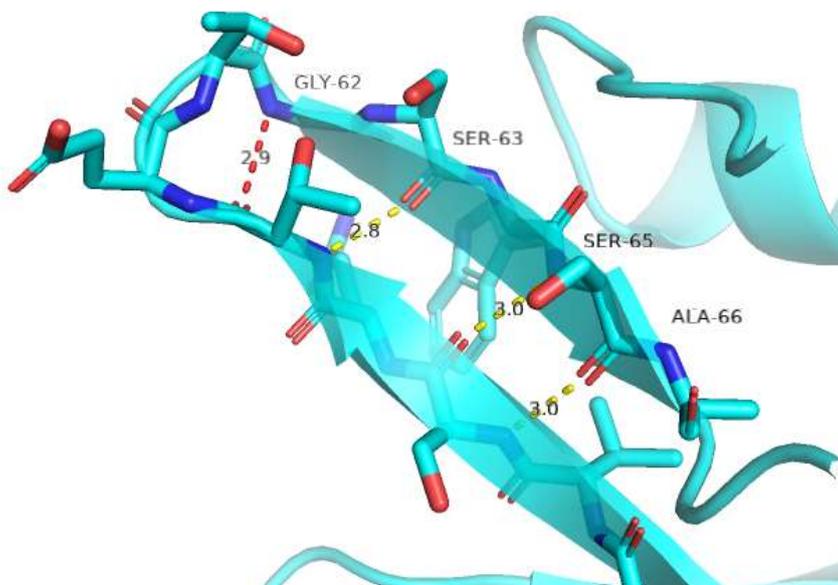


Рис.3. Участок структуры 1d4tA00. Размеченные dssp водородные связи, вошедшие в бета-лист, отмечены желтым, неразмеченная – красным.

Если рассматривать структуру 1h9oA00 (рис.4), видно, что dssp упустил две водородные связи, подходящие для формирования антипараллельного бета-листа – у глицина 66 и глицина 68 (отмечены красным). В таком случае бета-лист можно было бы продлить на два остатка, и бета-листы для двух этих структур в этих участках были бы примерно одинаковыми.

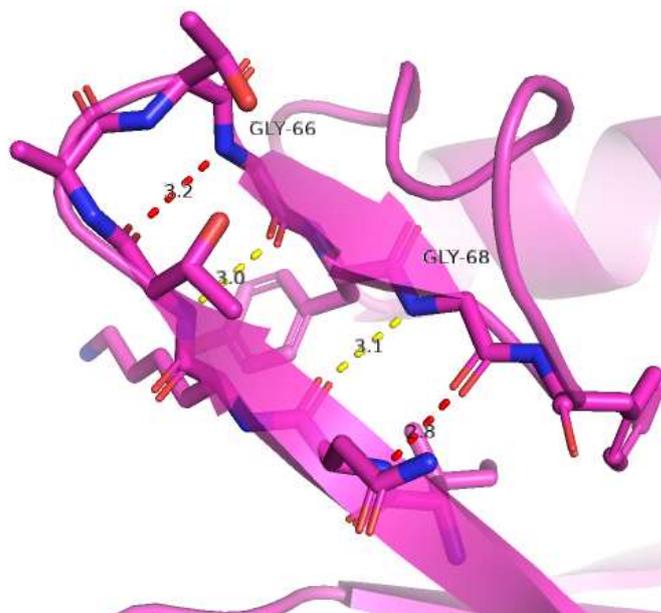


Рис.4. Участок структуры 1h9oA00. Размеченные dssp водородные связи, вошедшие в бета-лист, отмечены желтым, неразмеченные – красным.

Таким образом, были найдены неточности в разметке вторичной структуры алгоритмом dssp.

Задание 3. Работа с разметкой вторичной структуры в автоматическом режиме

В данном задании требовалось получить выдачу программу mkdssp для каждой из 10 структур и определить склонность к образованию типа вторичной структуры для каждого типа аминокислотных остатков: С – это петли, Е – это бета-листы, Н - альфа-спирали.

Результат представлен в таблице 1 и на рис.5.

Для моей выборки структур чаще быть в составе альфа-спиралей, чем бета-листов и петель, склонны глутамат, аланин, лейцин. В состав бета-листов, чем альфа-спиралей и петель, чаще входит изолейцин. А в состав петель входят пролин и глицин.

Табл.1. Склонности образовывать различные типы вторичных структур у аминокислот в 10 представленных структурах.

а.о.	С	Е	Н
A	0,91517	0,54585	1,84314
C	0,99730	1,54658	0,29012
D	1,25660	0,49712	0,91389
E	0,89757	0,49712	1,95833
F	0,64824	1,87799	0,87037
G	1,59344	0,22342	0,29338
H	0,96325	1,16398	0,89160
I	0,78537	1,73990	0,65278
K	1,15619	0,53924	1,15066
L	0,59273	1,08803	2,06918
M	1,04716	0,99423	0,87037
N	1,14689	0,77329	0,87037
P	1,46603	0,66282	0,08704

Q	0,92477	0,72308	1,58249
R	0,68814	1,85590	0,78333
S	1,31504	0,69365	0,48579
T	0,88063	1,20058	1,08386
V	0,83773	1,37867	0,97481
W	1,34635	0,49712	0,65278
Y	0,69980	1,95476	0,61959

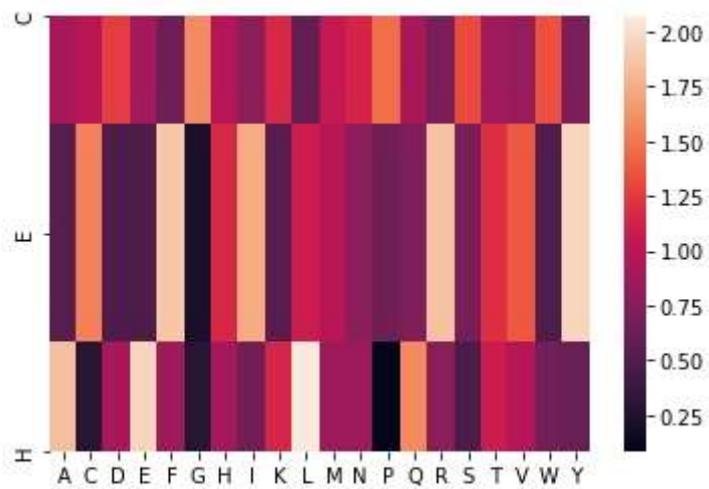


Рис.5. Тепловая карта склонности каждой аминокислоты (горизонтальная ось) образовывать петли (С), бета-листы (Е) или альфа-спирали (Н).