

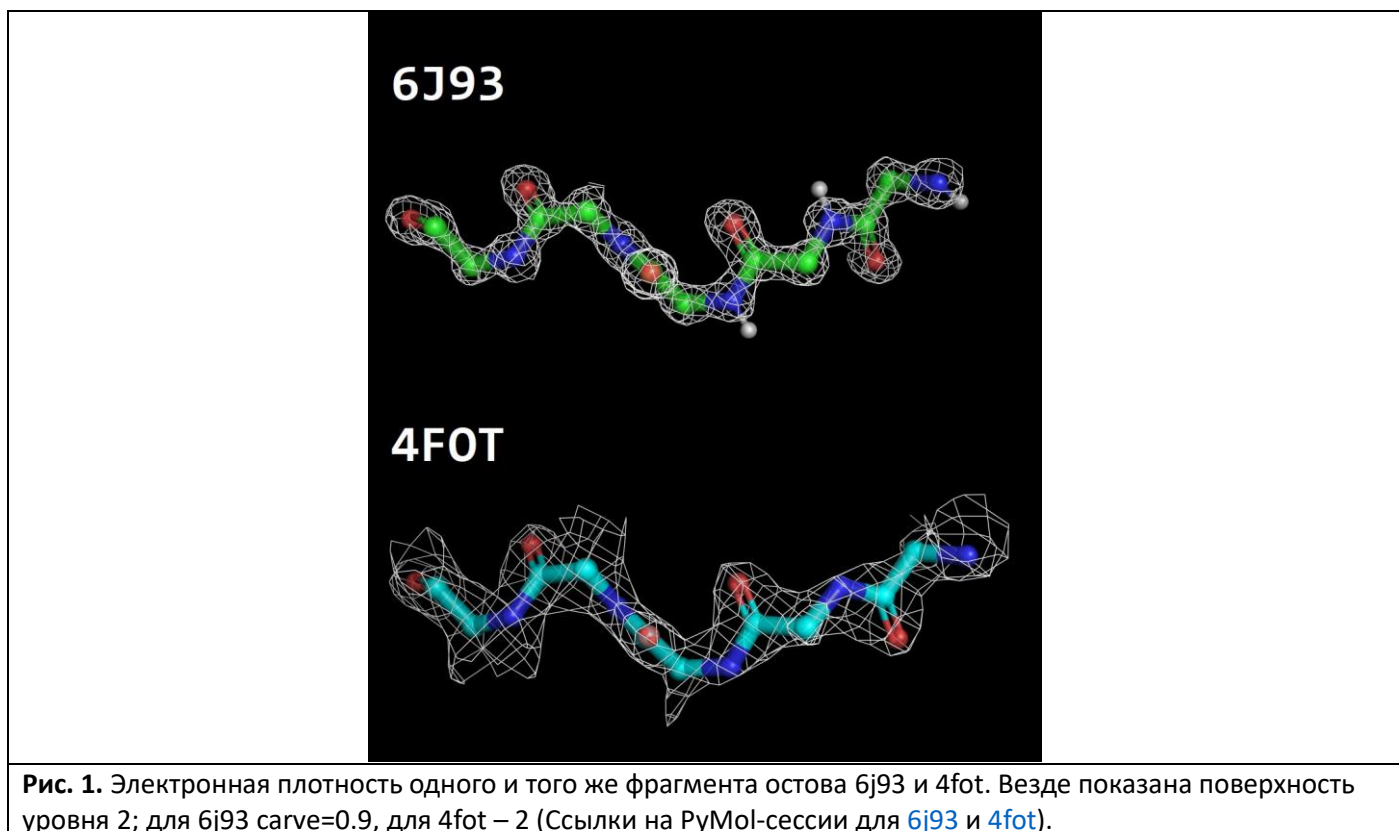
Практикум 2. Электронная плотность.

Николай Николаев

Задание 1

В рамках задания анализировали структуры [6J93](#) и [4FOT](#) – структуры пептидил-тРНК-гидролазы *Acinetobacter baumannii*. Наложением структур (командой align) было подтверждено отсутствие заметных различий между структурами.

На Рис. 1 представлена электронная плотность остова для аминокислот 40-44 (без учёта трёхаминокислотного экспрессионного тэга в 6j93). Из него хорошо видно, что структура 6j93 имеет лучшее разрешение: по её электронной плотности лучше различимы центры атомов.



Из PDB-файлов видно, что разрешение структуры 6j93 – 0.95 Å (completeness = 89%), 4fot – 2.2 Å (completeness = 99%). Это согласуется с выводами, сделанными из анализа внешнего вида сеток электронных плотностей.

Задание 2

В этом и последующем заданиях работа проводилась со структурой [3HCD](#) – фенилэтанолламин-N-метилтрансферазы человека в комплексе с норадреналином и S-аденозилгомоцистеином.

На Рис.2 представлена электронная плотность остова мономера белка на различных уровнях подрезки. Видно, что при увеличении порога подрезки первыми «теряют» электронную плотность поверхностные участки белка, мало контактирующие с прочими его частями и, скорее всего, представляющие собой подвижные петли. Скорее всего, их малая электронная плотность определяется различным положением этих участков белка в разных молекулах в кристалле. Пример такого участка отмечен на рисунке красной стрелкой.

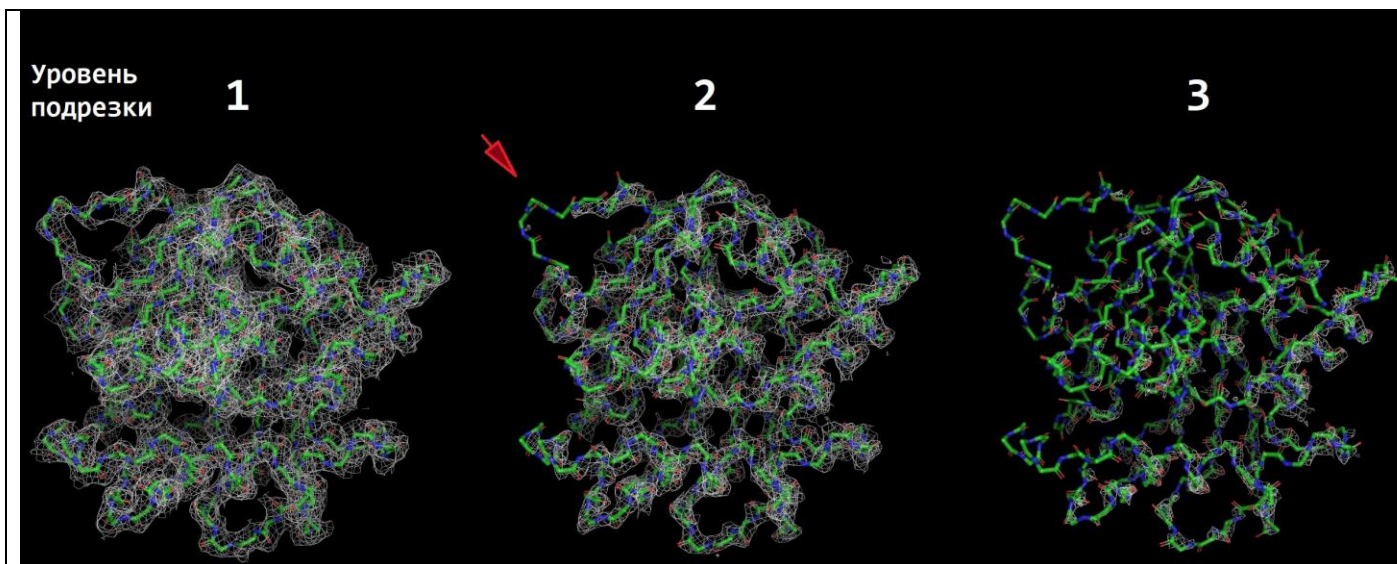


Рис. 2. Электронная плотность остова мономера белка на разных уровнях подрезки. Параметр `carve` везде равен 2. Красной стрелкой отмечен участок с более «размазанной», чем у прочих участков остова белка, электронной плотностью ([Ссылка на PyMol-сессию](#)).

Задание 3

На Рис. 3 представлена электронная плотность на разных уровнях подрезки для одного из лигандов белка – S-аденозилгомоцистеина.

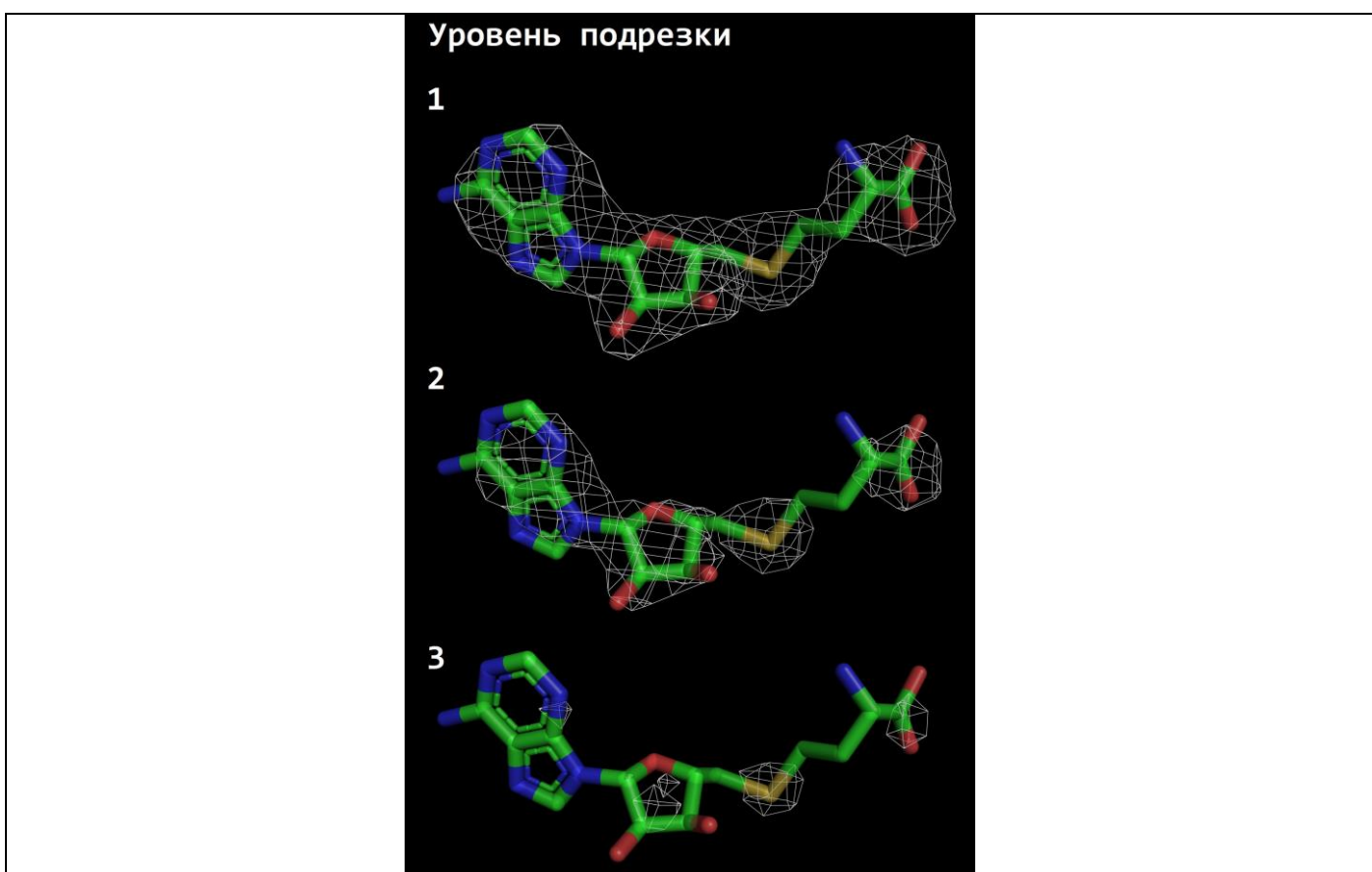


Рис. 3. Электронная плотность S-аденозилгомоцистеина на разных уровнях подрезки. Параметр `carve` везде равен 1.7 ([Ссылка на PyMol-сессию](#)).

Атомы, на которых электронная плотность сохраняется на больших уровнях подрезки, либо сами по себе имеют множество электронов (сера), либо, скорее всего, занимают из всех атомов лиганда наиболее схожее положение во всех ячейках кристалла; иными словами – сильнее остальных атомов лиганда стабилизированы

белком (карбоксильная группа, остаток рибозы). Последнее утверждение проиллюстрировано на Рис. 4. Из него видно, что остаток рибозы образует с белком две водородные связи; карбоксильная группа – три.

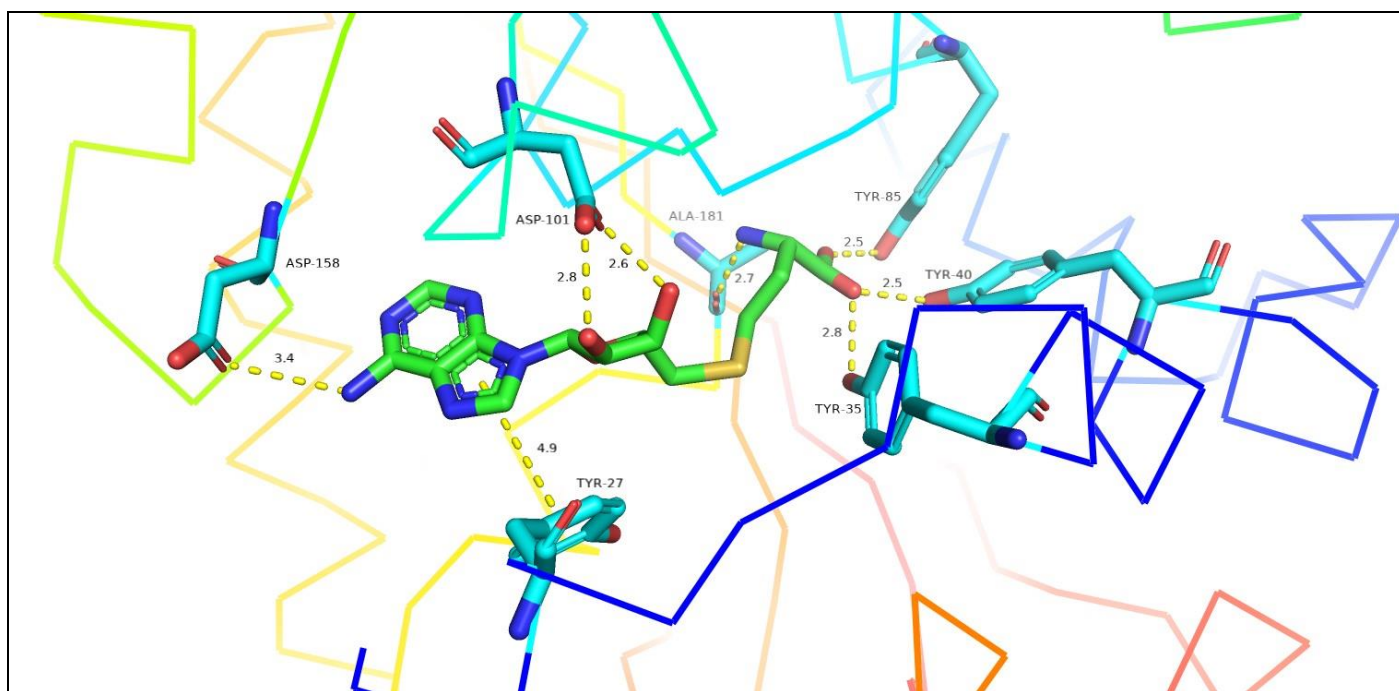


Рис. 4. Взаимодействия S-аденозилгомоцистеина с белком. Видно, что остаток рибозы и карбоксильная группа стабилизированы несколькими водородными связями ([Ссылка на PyMol-сессию](#)).