

Практикум 6. ЯМР

Николай Николаев

Задание 1

Для анализа выбрали 3 водородные связи:

- Между атомами остова внутри белка (в α -спирали): Val26 и Ile30 (Рис. 1);
- Между боковыми радикалами внутри белка: Lys27, Asp52 (Рис. 2);
- На поверхности белка: Met1 (аминогруппа) и Glu16 (радикал) (Рис. 3).

В Таблице 1 приведены параметры взаимодействий этих пар остатков в структурах, полученных методом РСА ([3ZLZ](#)) или ЯМР ([6K0X](#)). Если акцептором водородной связи выступает карбоксильная группа, расстояние измеряли от ближайшего к донору атома кислорода.

Таблица 1. Характеристики некоторых водородных связей в структуре, исследованной РСА и ЯМР					
Пара остатков	Расстояние в структуре РСА, Å	Моделей ЯМР с водородной связью	Минимальное расстояние в ЯМР, Å	Максимальное расстояние в ЯМР, Å	Медианное расстояние в ЯМР, Å
Val26 - Ile30	3,1	20 (100%)	3,1	3,2	3,2
Lys27 - Asp52	2,9	3 (15%)	2,5	9,2	5,55
Met1 - Glu16	2,5	1 (5%)	3,0	8,6	6,9

Из таблицы видно, что представленность водородных связей в моделях ЯМР отражает их устойчивость в белке.

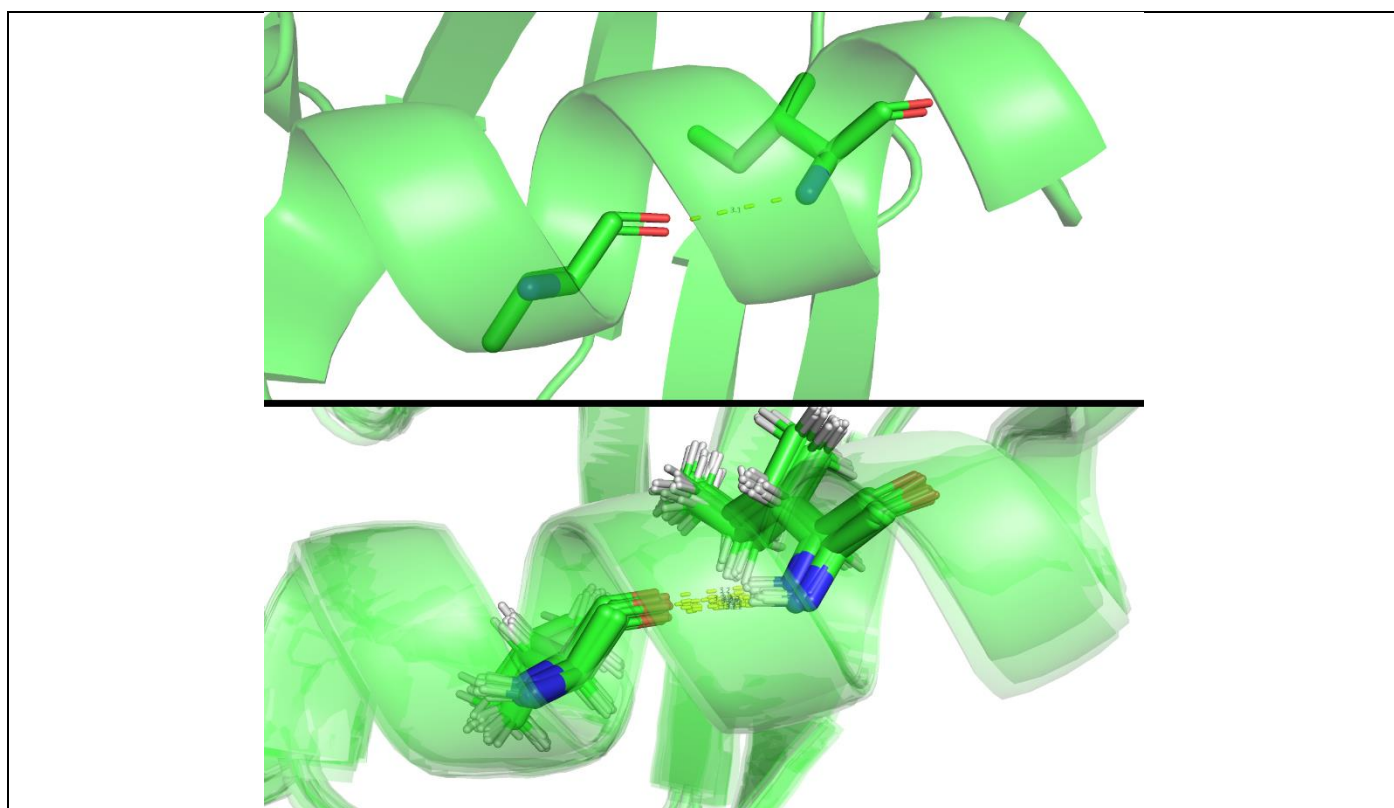


Рис. 1. Пара остатков Val26 - Ile30 в структурах, полученных РСА (сверху; [PyMol-сессия](#)) и ЯМР (снизу; [PyMol-сессия](#)).

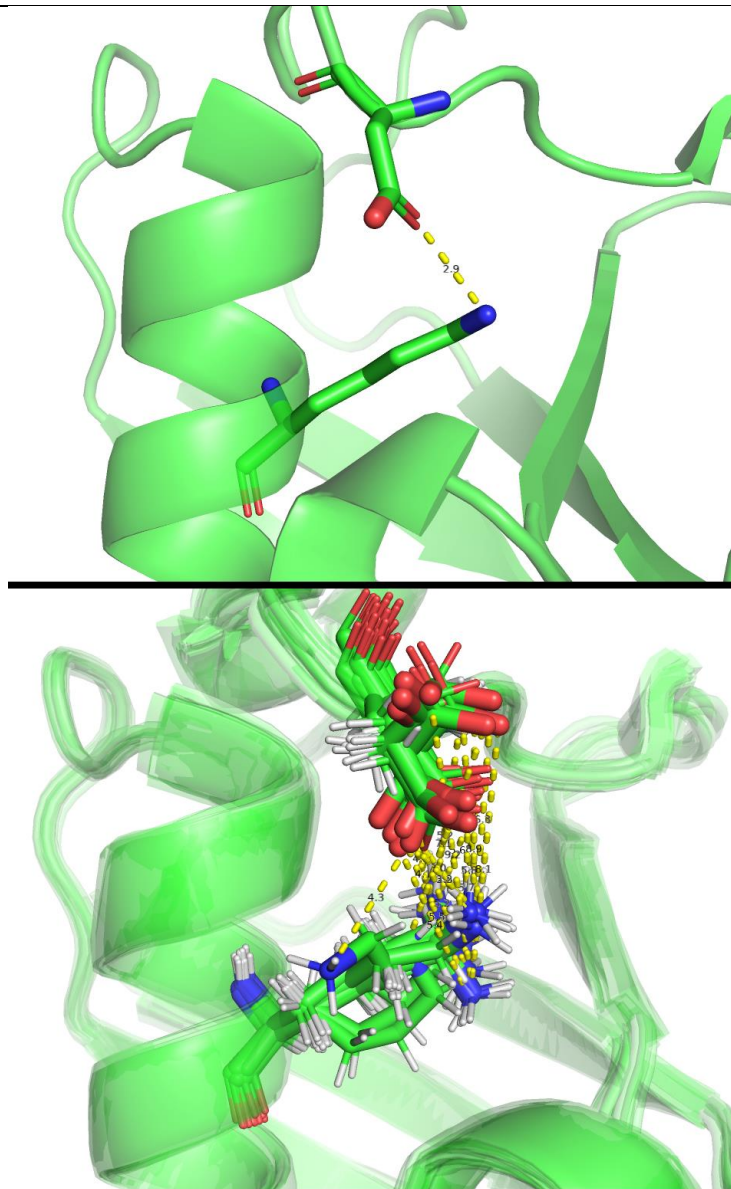


Рис. 2. Пара остатков Lys27 - Asp52 в структурах, полученных PCA (сверху; [PyMol-сессия](#)) и ЯМР (снизу; [PyMol-сессия](#)).

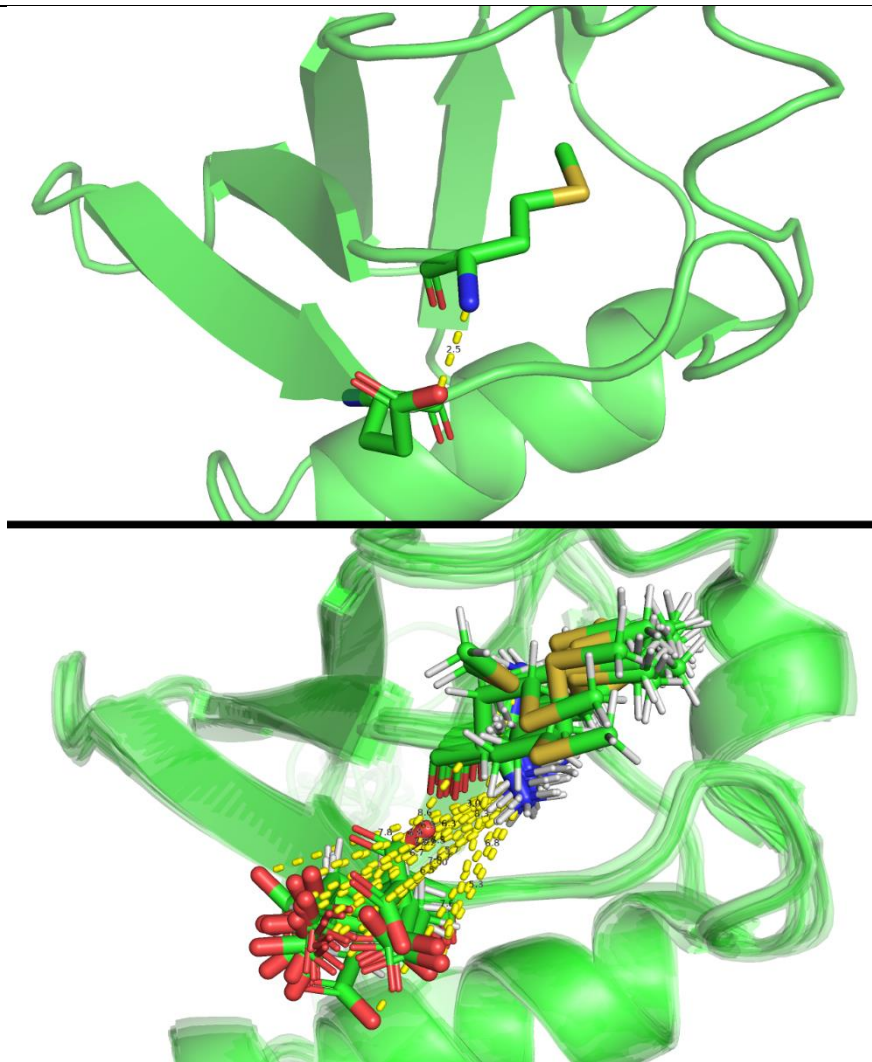


Рис. 3. Пара остатков Met1 - Glu16 в структурах, полученных PCA (сверху; [PyMol-сессия](#)) и ЯМР (снизу; [PyMol-сессия](#)).

Задание 2

С помощью [Python-скрипта](#) были получены средние значения RMSF для каждого остатка в модели ЯМР и средние значения В-фактора для каждого остатка цепи А в модели PCA ([ссылка на таблицу](#)). На графике зависимости одного от другого (Рис. 4) не наблюдается явной зависимости. Судя по всему, в данном случае различные положения атомов в моделях ЯМР не отражают реальной подвижности атома в белке.

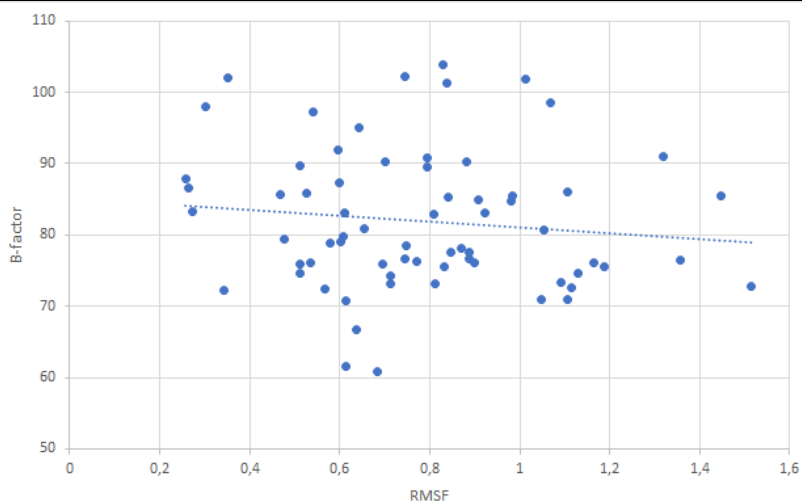


Рис. 4. График зависимости среднего RMSF и среднего В-фактора остатков.