

## Задание 1

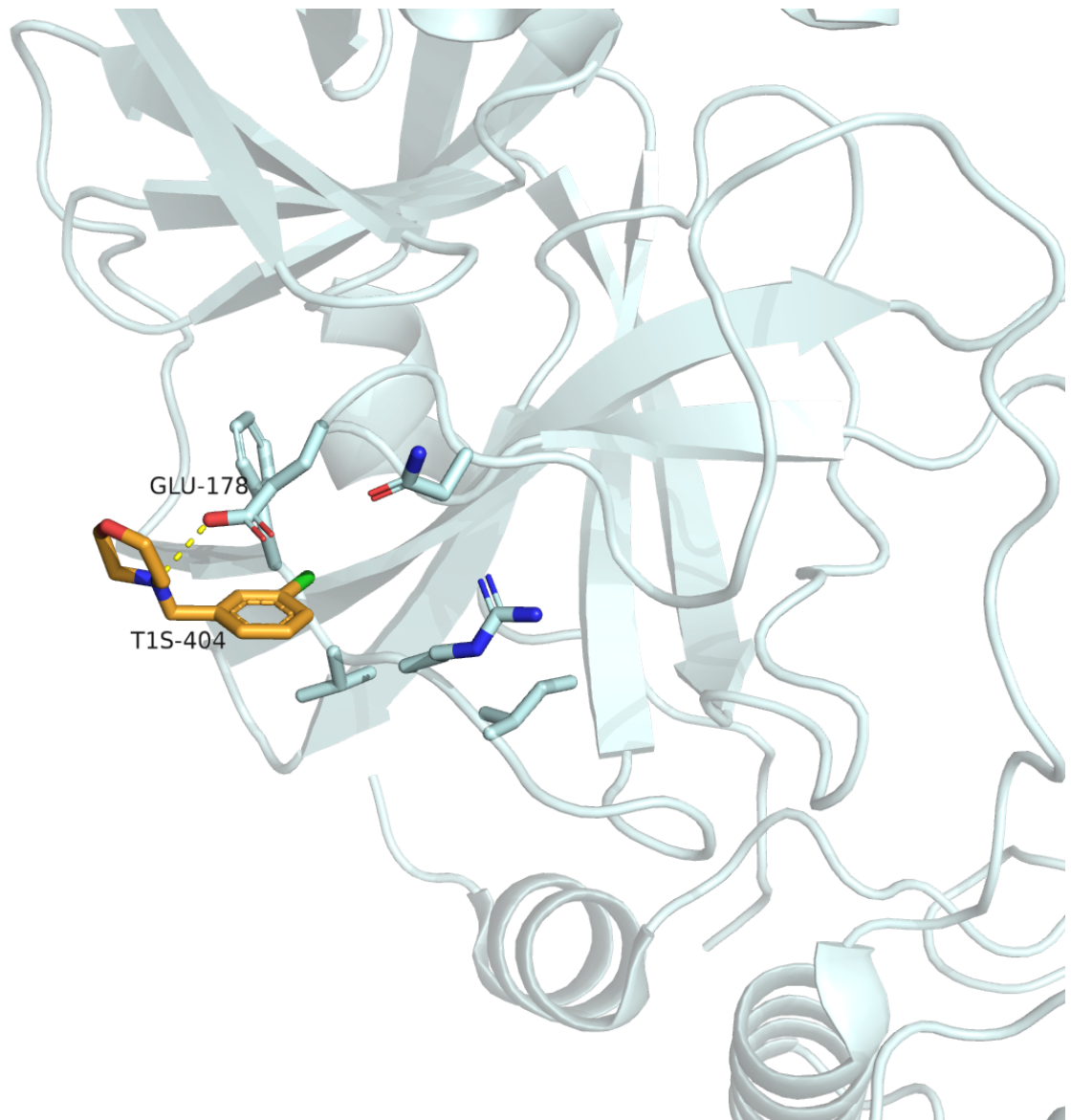


Рисунок 1. Связывание низкомолекулярного фрагмента с белком

## Задание 2

Сразу бросается в глаза различие в количестве молекул воды — в структуре 5VA9 их намного меньше. В остальном белки очень похожи.

5U3A на мой взгляд имеет лучшее разрешение так как объем участков с высокой электронной плотностью в ней больше. Разрешение 5U3A — 0.95 Å, а 5VA9 всего 2.55 Å, что подтверждает мои выводы

Как можно увидеть из рисунков ниже, в структуре 5UA3 плотность намного лучше согласуется с положением атомов. Это говорит о лучшем качестве проведенного PCA.

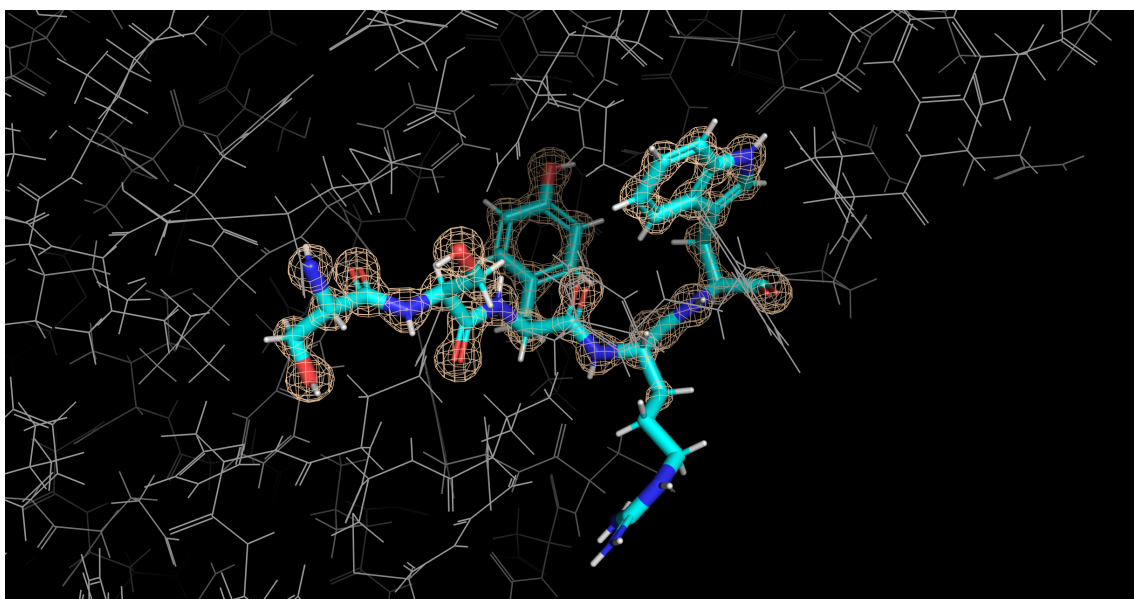


Рисунок 2. Электронная плотность вокруг части структуры 5U3A.  
Уровень подрезки 2, carve=2

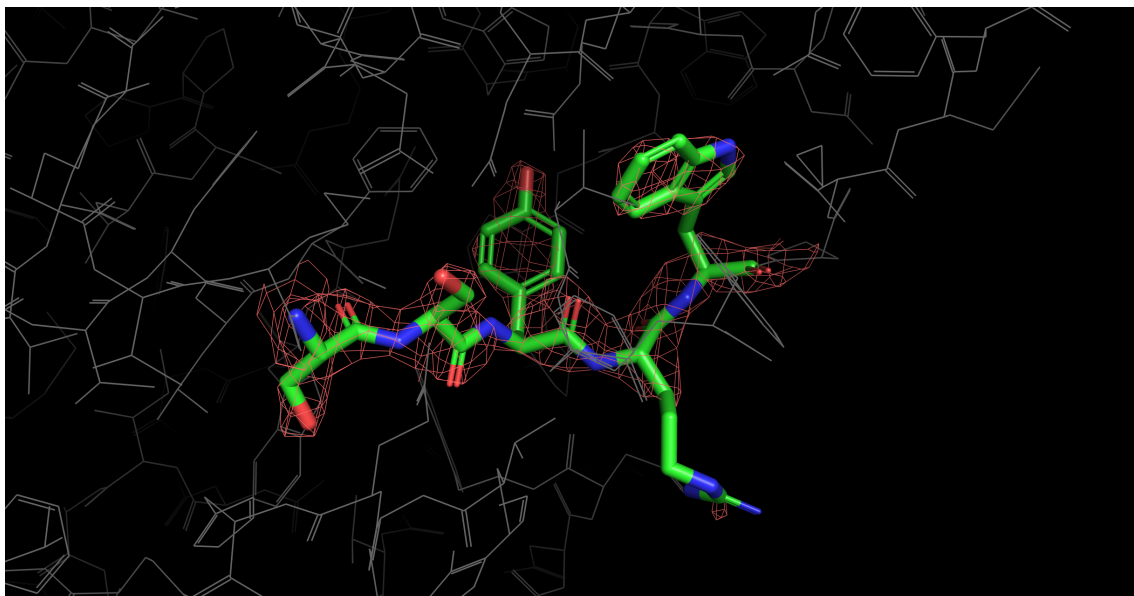
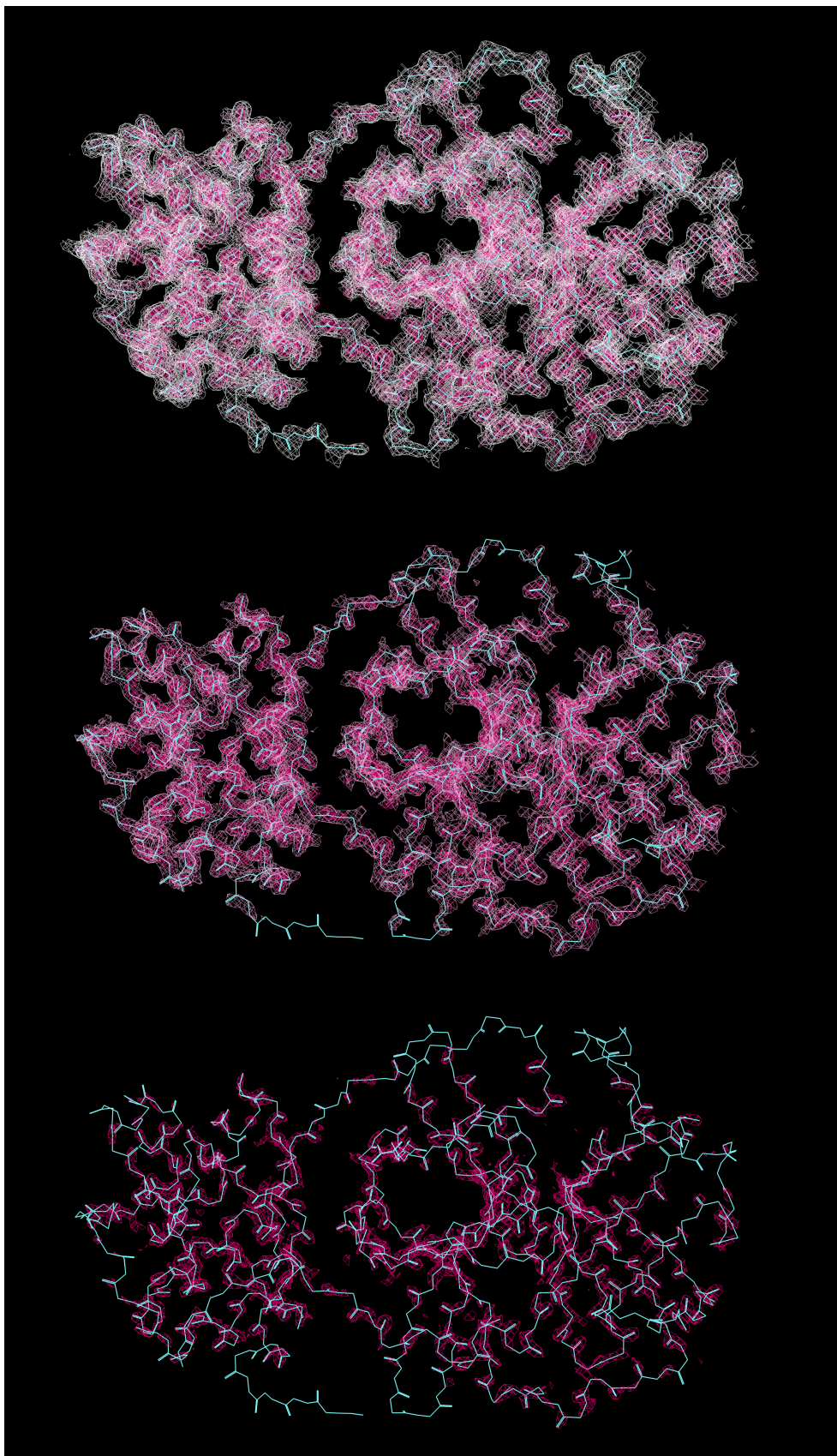


Рисунок 3. Электронная плотность вокруг части структуры 5VA9.  
Уровень подрезки 2, carve=2

### Задание 3

Первыми перестают покрываться выпетливания и внешние регионы белка.  
Возможно это связано с их большей подвижностью



## Задание 4

Даже на уровне подрезки 1 не все атомы покрыты электронной плотностью. Покрыты только атомы кислорода и хлора (и немного азота). Атом хлора как содержащий наибольшее количество электронов сохраняет на себе электронную плотность и на более высоких уровнях подрезки.

