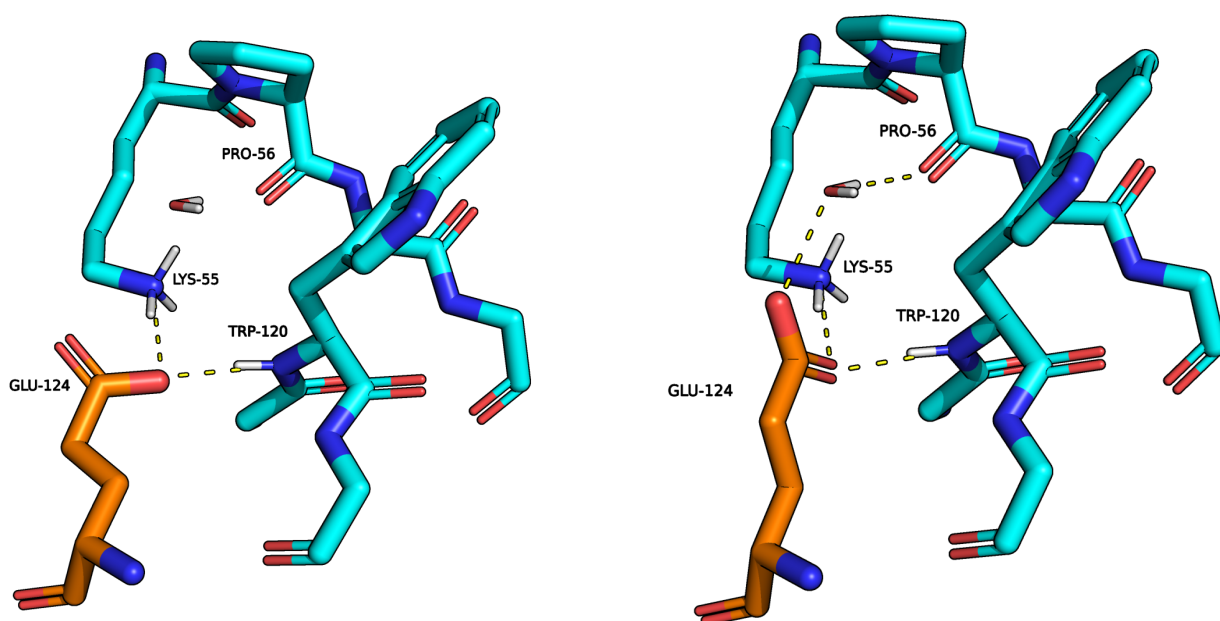


Практикум 2. Альтернативные положения, В-фактор, кристалл.

Задание 1

В этом задании надо было показать альтернативные положения остатка в молекуле белка 6AJW



Слева показано альтернативное положение А, а справа альтернативное положение В (желтым пунктиром показаны водородные связи). Они оба стабилизированы водородными связями с остатком лизина и азотом в остове белковой цепи (при этом с лизином дополнительно стабилизируются электростатическими взаимодействиями). На первый взгляд эти формы равнозначны и должны иметь одинаковую заселенность, однако форма В дополнительно стабилизирована остовом пролина, с которым форма В связана через водный мостик. На мой взгляд этого достаточно, чтобы значительно сместить равновесие в сторону формы В, так как водородные связи обладают достаточно высокой энергией. Это подтверждается если посмотреть на заселенность разных форм: у А она 0.34, а у формы В – 0.66

Задание 2

В этом задании надо было посмотреть как отличается B-фактор в разных частях молекулы

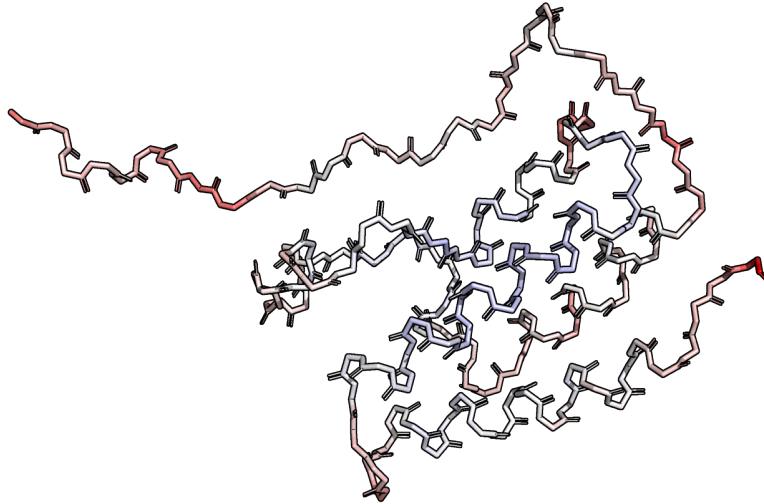
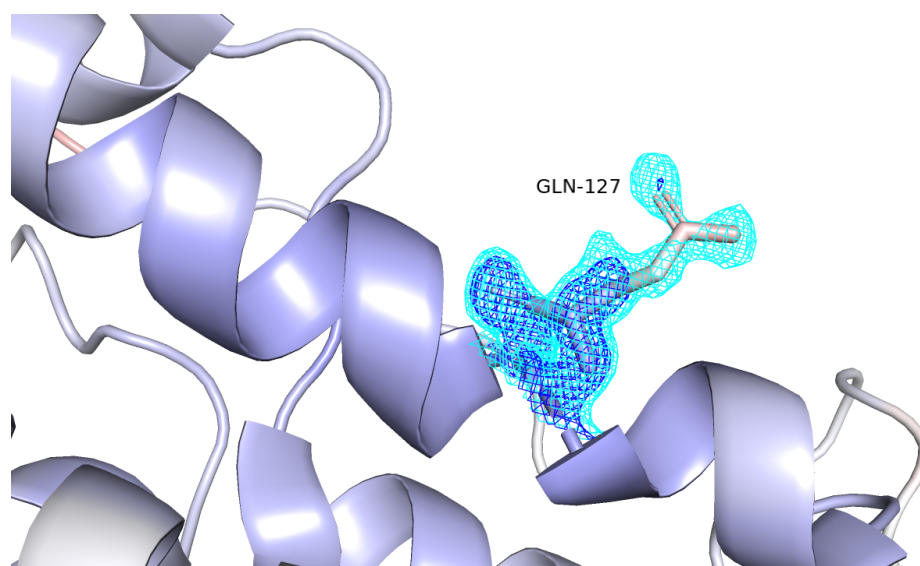
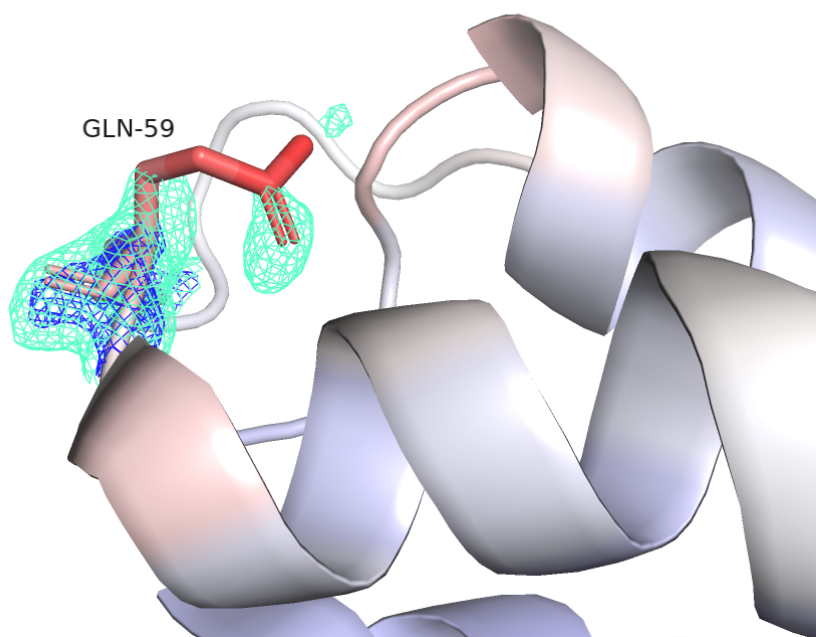


Рисунок. Остов молекулы, раскрашенный в соответствии с B-фактором. Красный цвет означает высокий B-фактор, синий – низкий.

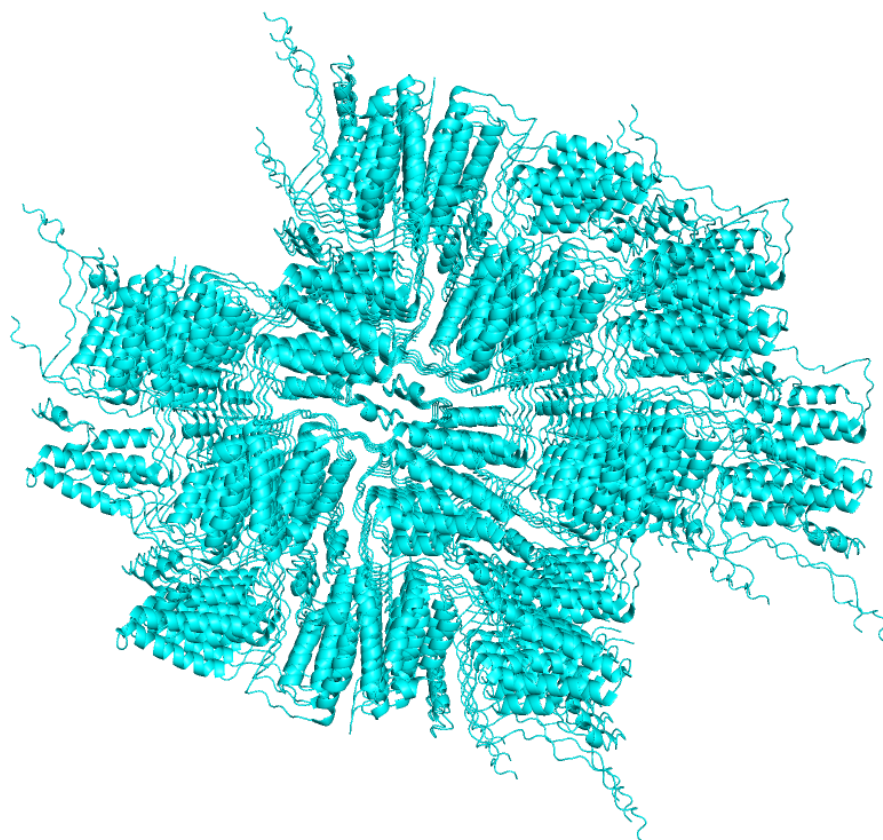
На рисунке видно, что большой B-фактор имеет части молекулы, которые не принимают участия в образовании альфа-спиралей и находятся дальше от центра молекулы. Большой B-фактор говорит в данном случае о большей подвижности молекул. По идее длинный хвост вверху должен иметь самый большой B-фактор, однако его величина примерно на уровне B-фактора небольших выпетливаний остова. Такой маленький B-фактор хвоста объясняется тем, что он стабилизируется кристаллической структурой образца (это будет видно дальше)

Ниже показаны два глутамина из разных частей молекул. У GLN-59 атомы бокового радикала имеют большой B-фактор ближе к концу, что говорит о его большей подвижности, видимо этот боковой радикал не стабилизируют никакие соседние остатки. Далее я визуализировал электронную плотность на уровне подрезки 1 (бирюзовый) и 2 (синий). Как можно заметить, там где B-фактор больше электронная плотность меньше. Это подтверждается если посмотреть на GLN-127, находящийся в альфа-спирали. Он обладает меньшим B-фактором при этом на тех же уровнях подрезки электронная плотность видна лучше.

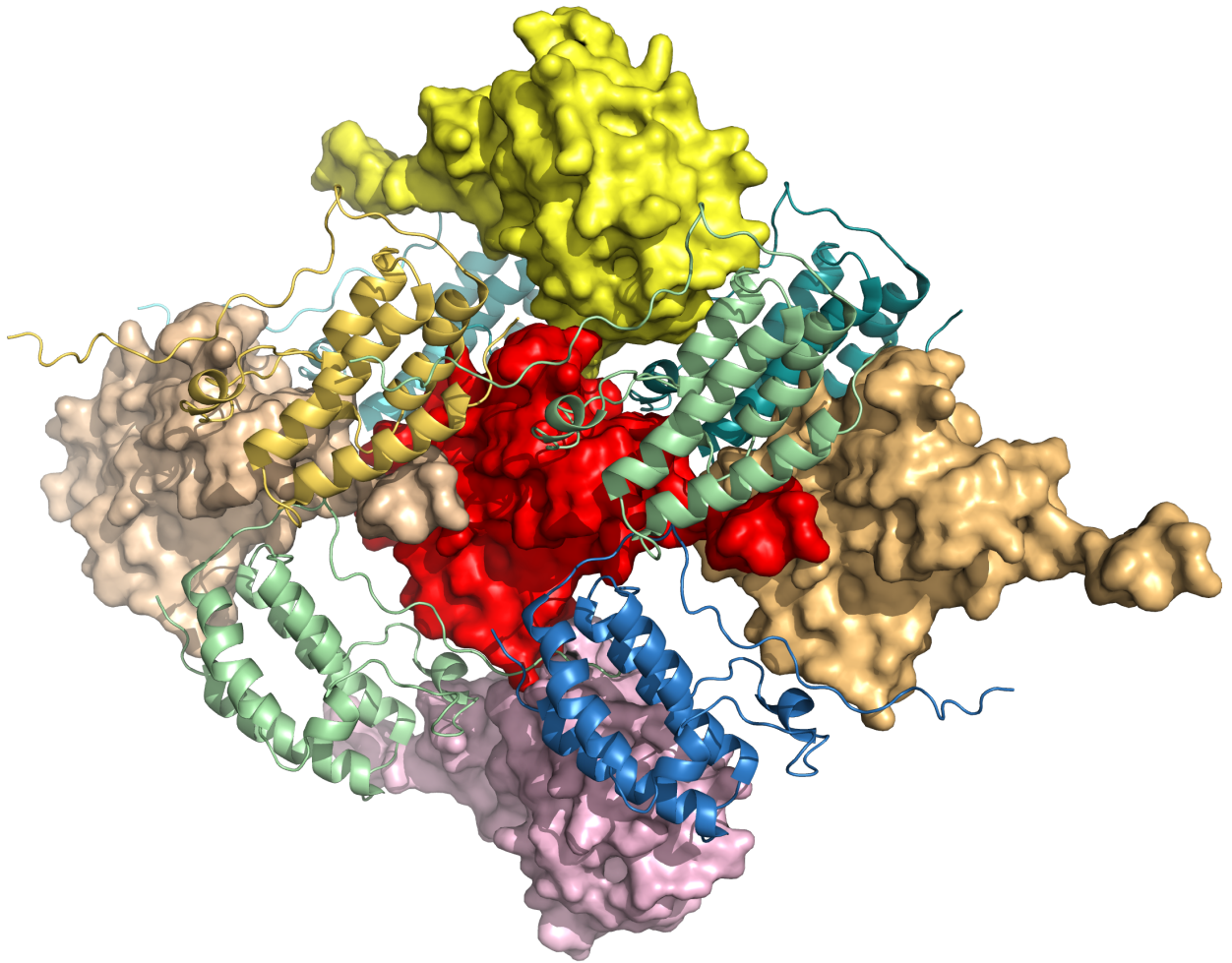


Задание 3

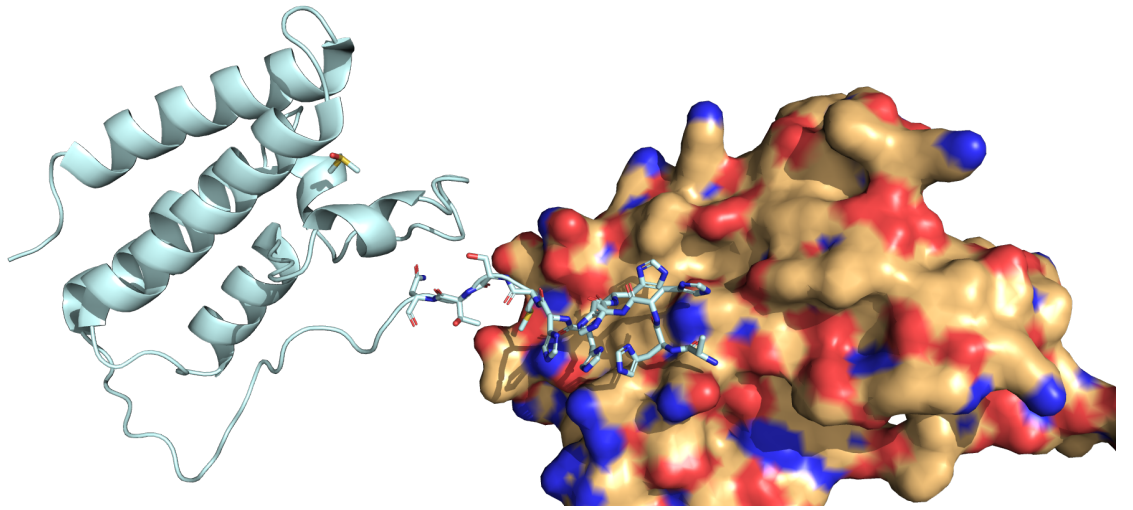
На рисунке ниже представлена восстановленная кристаллическая структура образца



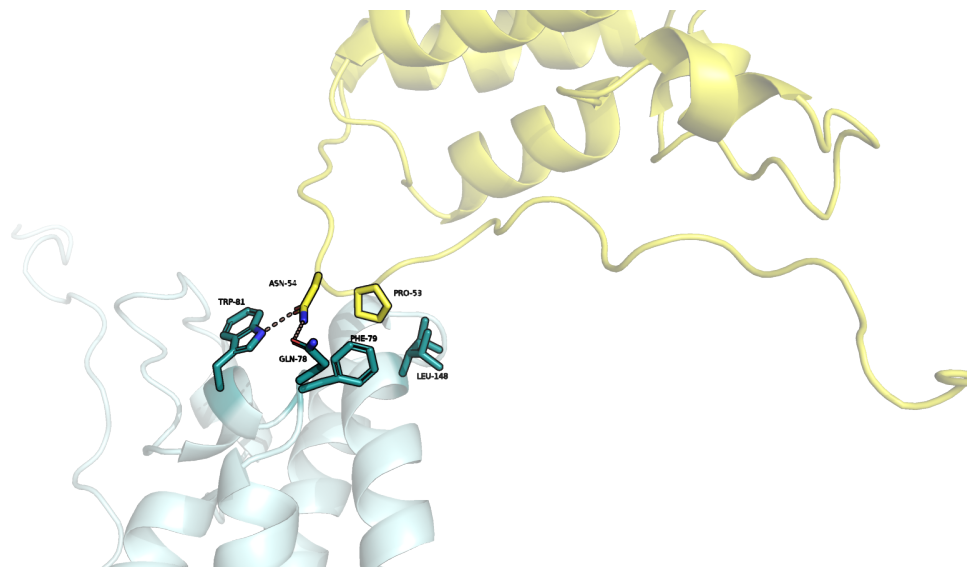
На следующем рисунке показан изначальный белок (красный) и контактирующие с ним соседи (10 штук)



Видно что белки контактируют в основном из-за наличия хвостов. При ближайшем рассмотрении оказывается, что это b α Nis тэг, который держится за соседний белок благодаря сходству по форме с его поверхностью.



Еще я нашел контакт белка со своим верхним соседом (точно такой же контакт есть и с нижним соседом)



Эти контакты вряд ли смогут существовать в физиологических условиях, так как в нормальном белке нет тэга. А второй контакт обеспечивается электростатическими взаимодействиями ASN-54 и гидрофобными взаимодействиями PRO-53, что кажется недостаточным в условиях организма.