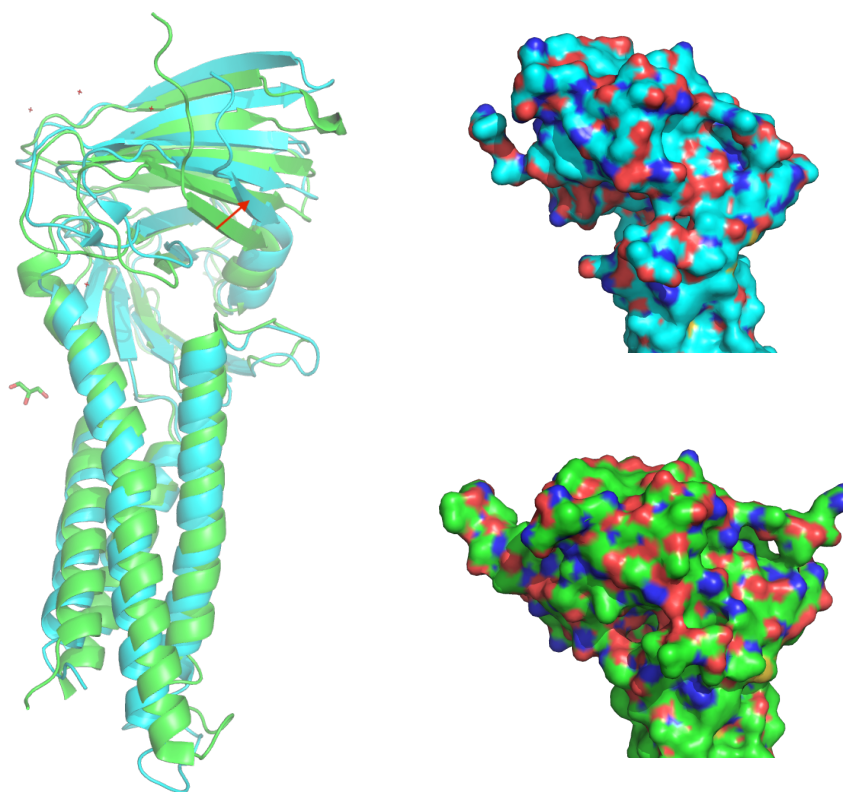


## Практикум 7

### Задание 1

В целом структуры 6ov2 (зеленая) и 6ov3 (синяя) не сильно отличаются друг от друга. Немного отличаются положения альфа-спиралей, чуть сильнее различается положение петель. Верхний бета-лист во второй структуре приоткрыт по сравнению с первой (красная стрелка). Если включить отображение поверхности можно явно увидеть образующийся в синем белке карман.

Ниже — таблица зависимости величин площадей поверхностей белков от метода измерения. Молекулярная площадь поверхности больше чем площадь поверхности, доступной растворителю, так как при вычислении MS не происходит перекрывания радиусов как в SAS, а значит в вычисленную поверхность попадает поверхность впадин, что увеличивает общую площадь.

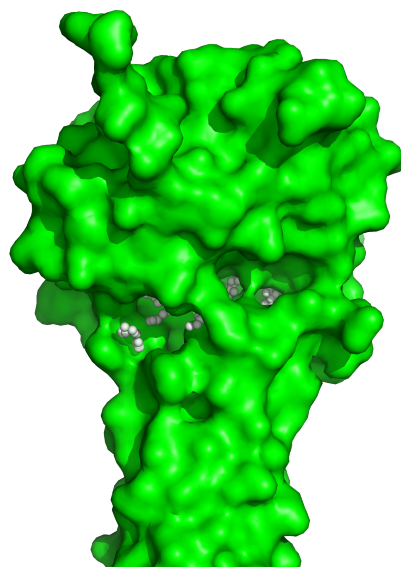
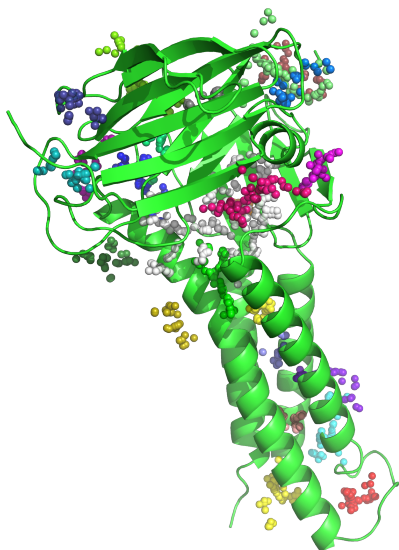


	MS, A <sup>2</sup>	SAS, A <sup>2</sup>
6OV2	30581	16412
6OV3	28767	15696

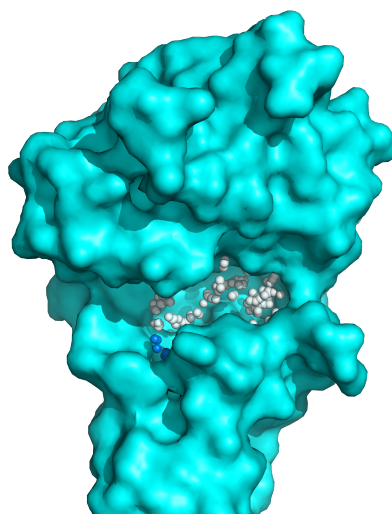
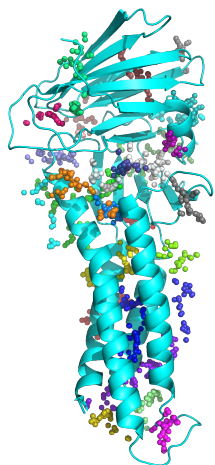
Кажется странным, что второй, очевидно находящийся в открытой конформации, белок имеет меньшую площадь поверхности. Однако это может быть вызвано тем, что у белка в закрытой конформации экспонируются некоторые остатки, которые погружены в белок при открытой конформации.

## Задание 2

Программа frocket определила в структуре bov2 24 потенциальных кармана. Большинство из них не выглядят правдоподобно. Больше всего на карман связывания который я предположил в 1 задании похож карман 0 (отмечен белым справа) его объем в этой структуре —  $3568 \text{ \AA}^3$



В структуре bov3 нашлось 29 карманов. Больше всего на предыдущий похож карман 0 (белые сферы). Его объем  $2617 \text{ \AA}^3$ . Карман в открытой форме белка оказался меньше чем в закрытой. Похоже, это связано с тем, что в закрытой форме белка рядом с карманом связывания образуются дополнительные полости которые программа считает продолжением кармана.



### Задание 3

В закрытой форме значение АСС аланина 204 (красный) = 22, а в открытой = 108. Таким образом этот остаток больше всего изменил свою экспонированность относительно других. Этот остаток находится после «открывающегося» конца бета-листа о котором я упоминал в первом задании. В закрытой конформации белка аланин направлен в сторону бета листа и плотно окружен соседними остатками, которые почти полностью перекрывают доступ растворителю. В открытой же конформации аланин направлен в сторону среды и ему ничего не мешает взаимодействовать с растворителем

