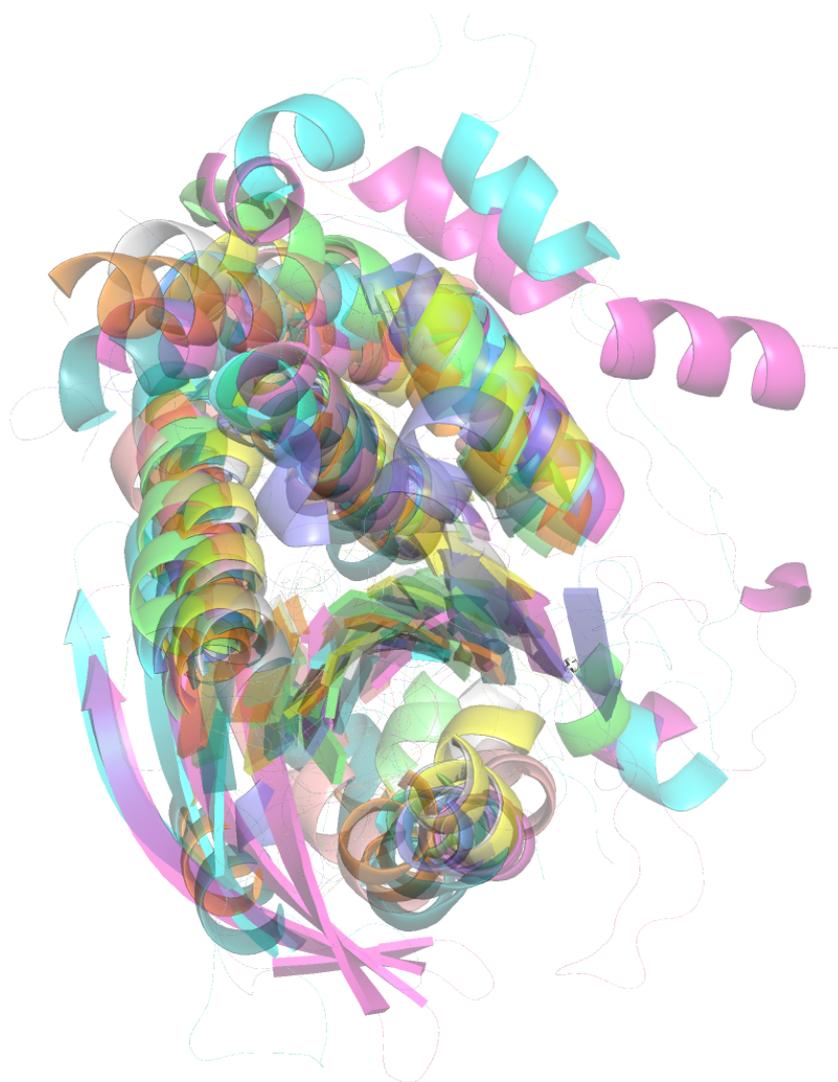


Практикум 8

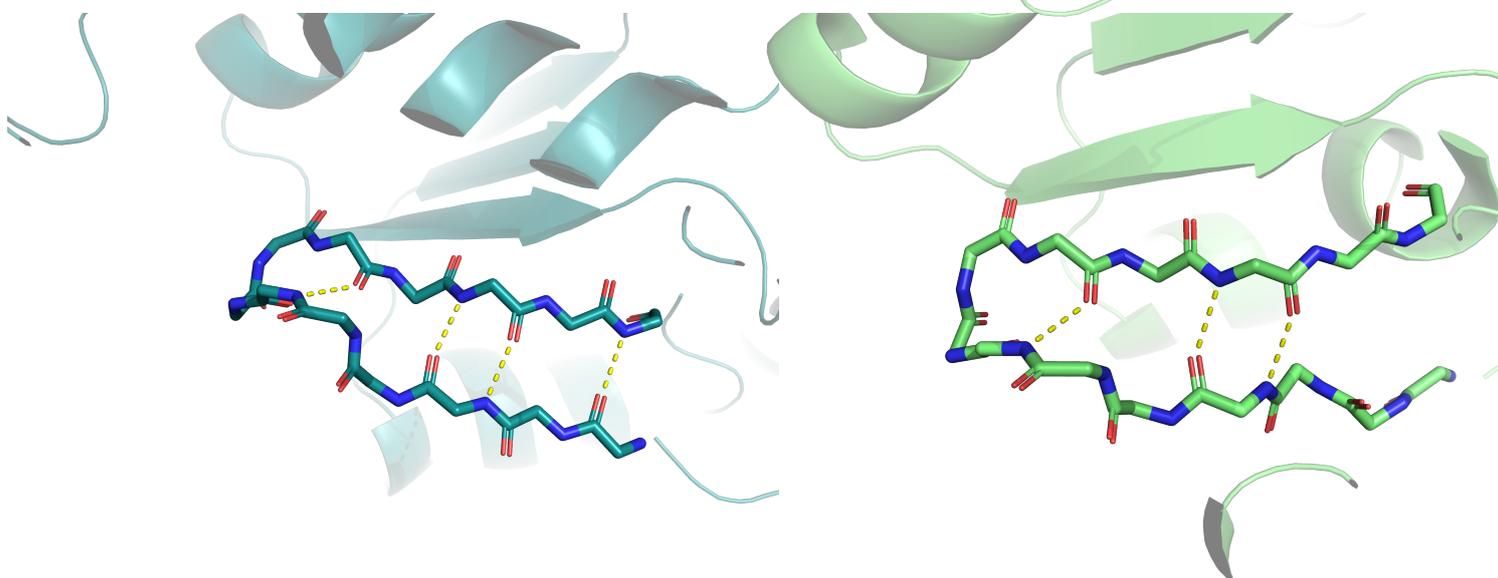
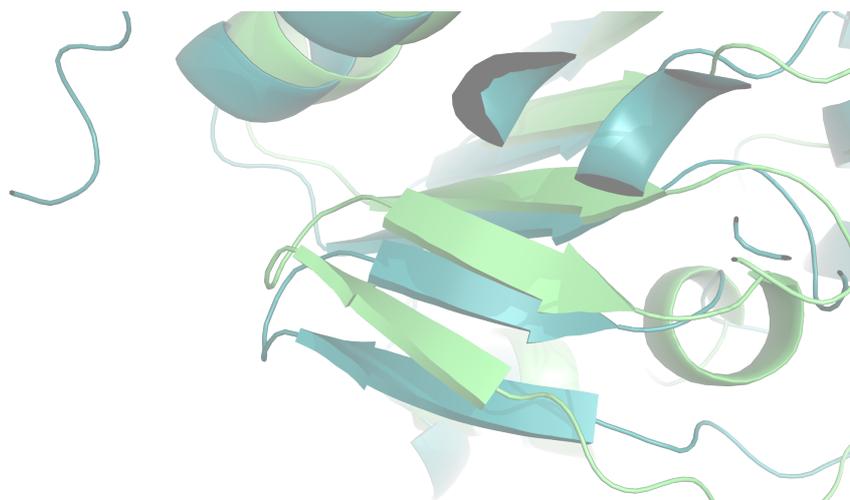
Задание 1

Выровняв все 10 структур, можно заметить, что их укладка довольно похожа — ядро из 4-х альфа-спиралей наверху и отделенная от них бета-листом спираль внизу. Но есть и небольшие отличия, так у голубой и розовой структуры есть дополнительные небольшие альфа-спирали, а бета-лист продолжается дальше чем у других структур. К тому же петли у всех структур идут совершенно по-разному. Еще в некоторых структурах альфа-спирали изогнуты, а в других нет.



Задание 2

Ниже сравниваются бета-листы структур 4r30A00 (темно-зеленая) и 4d3pA00 (светло-зеленая). У светло-зеленой структуры крайний бета-тяж отображается короче чем у темно-зеленой. Если посмотреть подробнее, становится ясно почему так — у светло зеленой структуры кислород в боковой цепи (который находится справа внизу) направлен в другую сторону от остова и не образует водородную связь как в темно-зеленой. На мой взгляд такая разметка вторичной структуры обоснована.



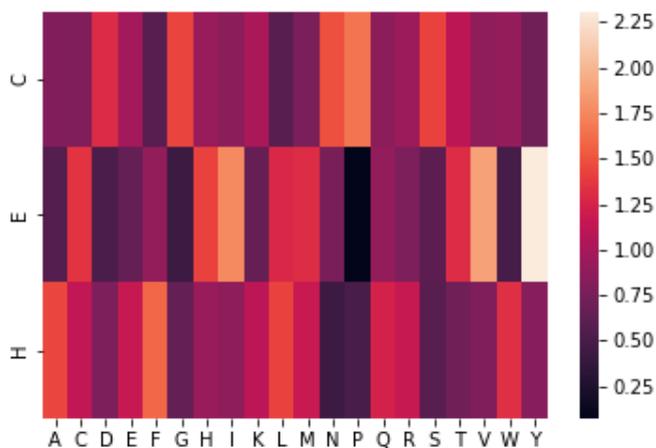
Задание 3

Для вычисления склонностей остатков образовывать определенный тип вторичной структуры я использовал notebook который лежит в директории с отчетом. Ниже представлена тепловая карта и таблица с величинами склонностей остатков к образованию вторичной структуры (E — лист, H — петля, C — петли).

Сразу бросается в глаза тирозин — он намного чаще образует бета-листы, возможно для этой группы белков необходимо наличие тирозинов в бета-листе для поддержания третичной структуры или катализа.

Чаще всего образует петли, ожидаемо, пролин. Он не может образовывать водородные связи необходимые для поддержания вторичной структуры, поэтому редко в них встречается.

Альфа спирали чаще всего образуют фенилаланин и аланин. Скорее всего это обусловлено образованием гидрофобного ядра из альфа-спиралей и эти остатки нужны для обеспечения гидрофобных взаимодействий между спиральями.



	A	C	D	E	F	G	H	I	K	L	M	N	P	Q	R	S	T	V	W	Y
C	0.80	0.79	1.31	0.99	0.59	1.44	0.92	0.86	1.02	0.59	0.77	1.49	1.65	0.85	0.94	1.43	1.11	0.88	0.91	0.72
E	0.57	1.35	0.51	0.65	0.90	0.42	1.43	1.76	0.66	1.29	1.32	0.75	0.07	0.89	0.79	0.61	1.32	1.89	0.49	2.31
H	1.45	1.14	0.78	1.17	1.60	0.65	0.93	0.87	1.11	1.43	1.18	0.44	0.50	1.24	1.17	0.58	0.71	0.79	1.34	0.83