

Практикум 2

Задание 1

Были даны две модели одного белка - 6L27 (2020) и 5B61 (2017). Это зеленый флуоресцентный белок (GFP) из медузы *Aequorea victoria*.



Отличия, которые сразу бросились в глаза: в элементарной ячейке 6L27 один белок, в 5B61 - шесть; в 6L27 есть много молекул растворителя (воды), 5B61 - нет молекул воды вообще.

Была выбрана одна из молекул белка из 5B61. Для дальнейшего сравнения моделей была использована команда align.

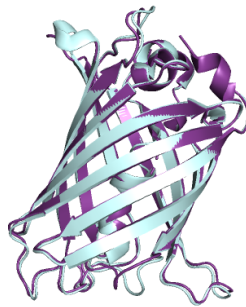


Рисунок 1. Выравнивание 6L27 и одного белка из 5B61. 6L27 фиолетовый, 5B61 - мятный.

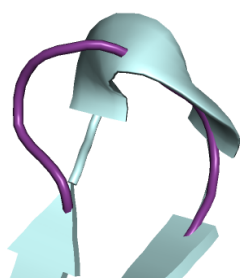


Рисунок 2. Пример различия моделей 6L27 и 5B61. 6L27 фиолетовый, 5B61 - мятный.

На рисунке 2 видно разное распознавание вторичной структуры в двух моделях.

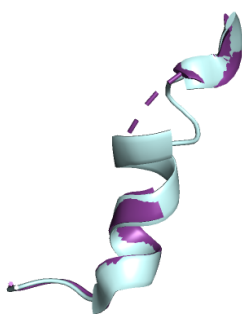


Рисунок 3. Пример различия моделей 6L27 и 5B61. 6L27 фиолетовый, 5B61 - мятный.

На рисунке 3 видно, что фиолетовая структура имеет гэп.

Для сравнения карт электронной плотности были выбраны аминокислотные остатки 178-184, которые являются частью непосредственно бета-барреля. Изображения были получены с помощью команды isomesh на уровне подрезки 2.

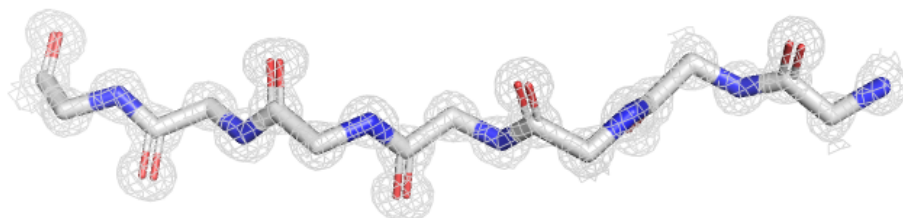


Рисунок 4. Электронная плотность части структуры 6L27, carve=1.2

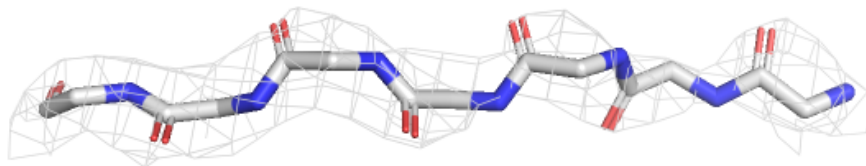


Рисунок 5. Электронная плотность части структуры 5B61, carve=1.6

На рисунках 4 и 5 видно, что карты электронной плотности двух структур различаются кардинально. Для структуры на рисунке 4 электронная плотность представляет собой сферы вокруг атомов остова. В структуре на рисунке 5 не выделяются отдельные атомы, поверхность электронной плотности сглаженная, обозначает только изгибы остова. Можно предположить, что разрешение модели на рисунке 4 выше, чем модели на рисунке 5. И действительно разрешение модели на рисунке 4 (6L27) - 0.77 Å, а на рисунке 5 (5B61) - 3.12 Å, что значительно ниже.

Задание 2

Было дана модель 4F2Q. Это мутантный по 655 остатку глутаматный рецептор, связанный с квисквалатом из организма *Rattus norvegicus*.

Изображения сделаны с помощью команды `isomesh, carve = 1.9`.

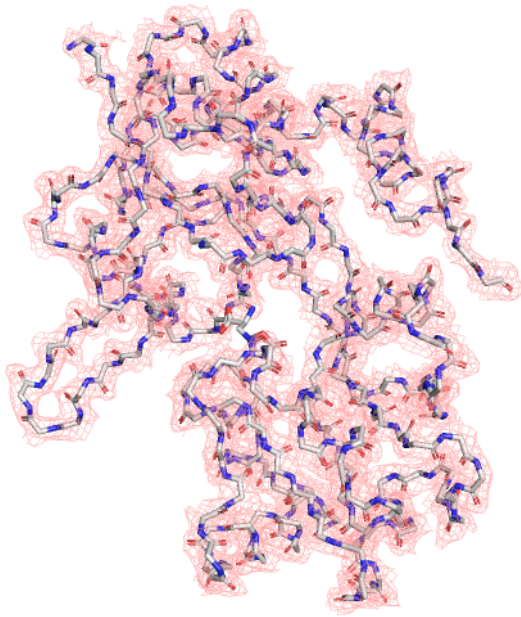


Рисунок 6. Электронная плотность всей структуры 4F2Q, уровень подрезки 1.

Далее показана только часть структуры, чтобы можно было рассмотреть детали.

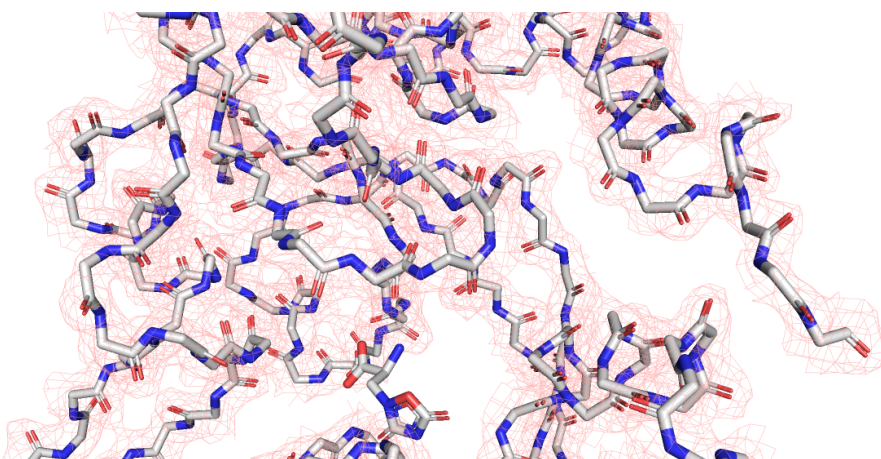


Рисунок 7. Электронная плотность части структуры 4F2Q, уровень подрезки 1.

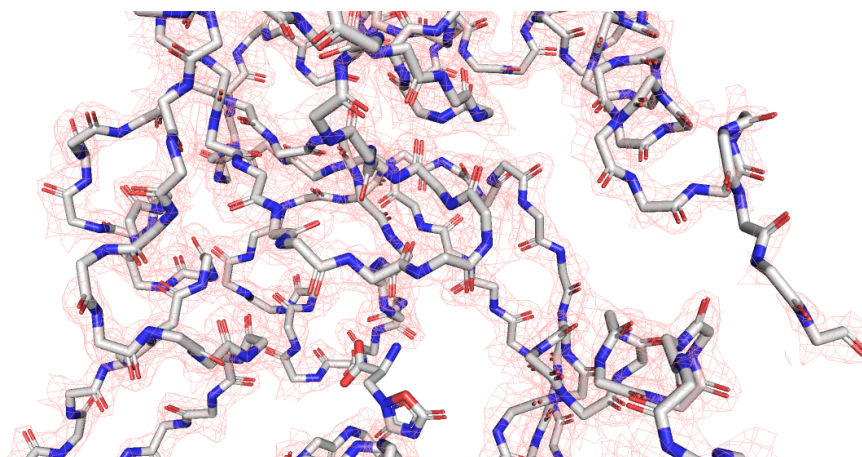


Рисунок 8. Электронная плотность части структуры 4F2Q, уровень подрезки 2.

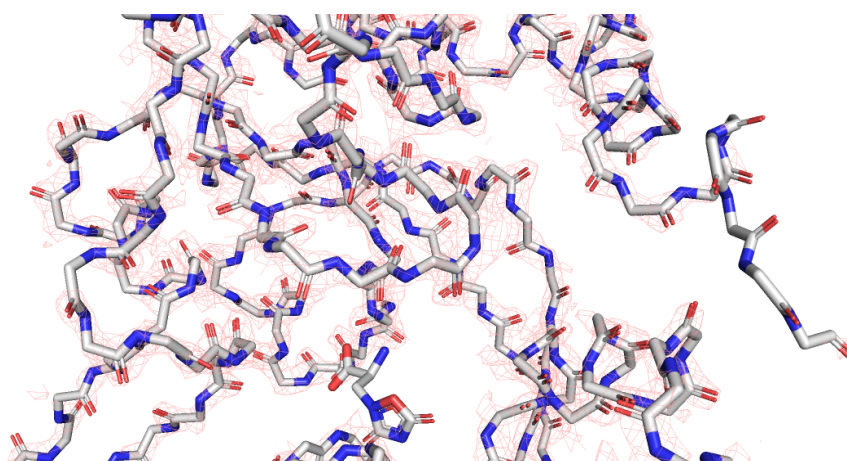


Рисунок 9. Электронная плотность части структуры 4F2Q, уровень подрезки 3.

Рассматривая карты электронной плотности на рисунках 7-9 видим, что с увеличением уровня подрезки электронная плотность постепенно перестает покрывать все атомы остова. Быстрее всего электронная плотность пропадает с периферии молекулы, сохраняясь в центре. Причём С-конец показал себя как наиболее уязвимое место. Мое предположение состоит в том, что участки на периферии молекулы белка имеют меньше внутримолекулярных связей и являются более подвижными, поэтому при измерении электронная плотность этих участков оказывается ниже. В пользу этой теории говорит и исчезновение электронной плотности с С-конца, в то время как N-конец остается покрыт, так как С-конец экспонирован, а значит обладает большей подвижностью, в то время как N-конец находится «внутри» молекулы.

Задание 3

Структура 4F2Q содержит два лиганда - ион цинка и квисквалат. Интересно рассмотреть электронную плотность квисквалата.

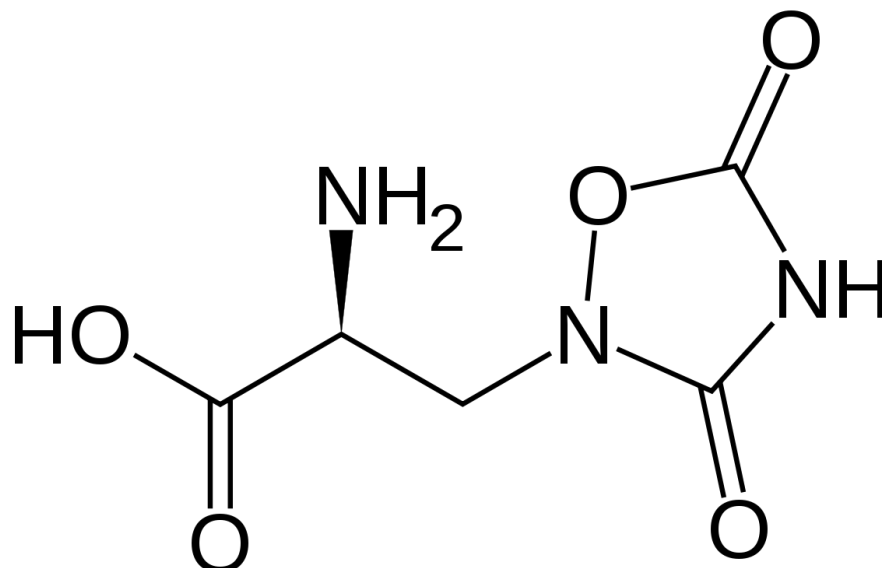


Рисунок 10. Структурная формула квисквалатовой кислоты.

Изображения были получены с помощью команды `isomesh, carve = 1.8`.

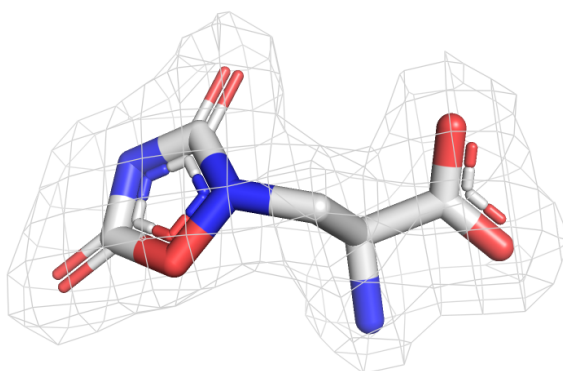


Рисунок 11. Электронная плотность квисквалата из структуры 4F2Q, уровень подрезки 1.

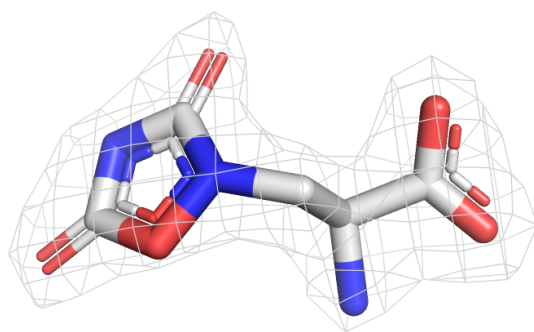


Рисунок 12. Электронная плотность квисквалата из структуры 4F2Q, уровень подрезки 2.

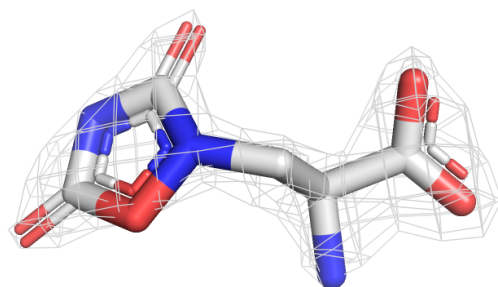


Рисунок 13. Электронная плотность квисквалата из структуры 4F2Q, уровень подрезки 3.

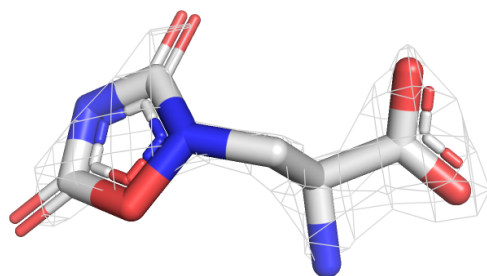


Рисунок 11. Электронная плотность квисквалата из структуры 4F2Q, уровень подрезки 3.5.

На уровне подрезки 1 все атомы лиганда покрыты электронной плотностью. С увеличением уровня подрезки поверхность электронной плотности уменьшается, больше всего мне нравится изображение на уровне подрезки 2. На уровне подрезки 3 атом азота вне кольца уже немного «вылезает», но чтобы понять паттерн исчезновения электронной плотности я сделала ещё и изображение на уровне подрезки 3.5. На уровне подрезки 3.5 электронная плотность остается в основном на двух карбонильных и карбоксильной группах, а также на аминогруппе, что весьма логично, так как кислород и азот более электроотрицательны, чем углерод.