

# Практикум № 3. Альтернативные положения, В-фактор, кристалл

## 1 Альтернативные положения

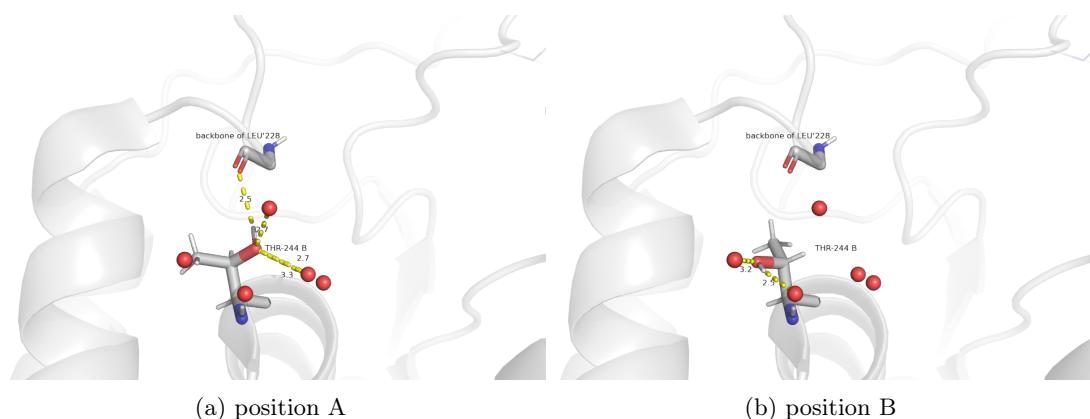


Рис. 1: Взаимодействия различных положений THR'244 со своим окружением.

Треонины 244 в белке 6Y1P находится во внешней оболочке белка и соприкасается с растворителем. Он также может находиться в двух альтернативных положениях. В положении А треонин образует -ОН группой водородную связь с атомом кислорода остова лейина 228. Также эта -ОН группа может быть акцептором водородной связи от двух рядом расположенных молекул воды.

В положении В -ОН группа оказывается "вывернутой" наружу белка и рядом от нее оказываются расположены только молекулы воды, с которыми она и образует водородные связи.

Мне казалось, что положение А должно быть более стабильным, так как в нем есть связь боковой цепи треонина с остовом белка. Однако по данным PDB населенность положения А в два раза меньше, чем положения В:

АТОМ	4228	Н	АTHR	А	244	54.693	-1.033	131.887	0.33
АТОМ	4229	Н	ВTHR	А	244	54.752	-0.993	131.853	0.67

Расположения остова не сильно отличаются у двух положений - таким образом отнеси эту разницу за счет каких-то изгибов остова не получается.

Еще одно заметное отличие, которое есть у двух положений состоит в том, что у положения А гидрофобная  $-CH_3$  группа треонина вывернута наружу, на поверхность белка, а в положении В  $-CH_3$  группа "спрятана внутрь". Возможно, именно за счет этого положение В и оказывается более устойчивым.

## 2 В-фактор

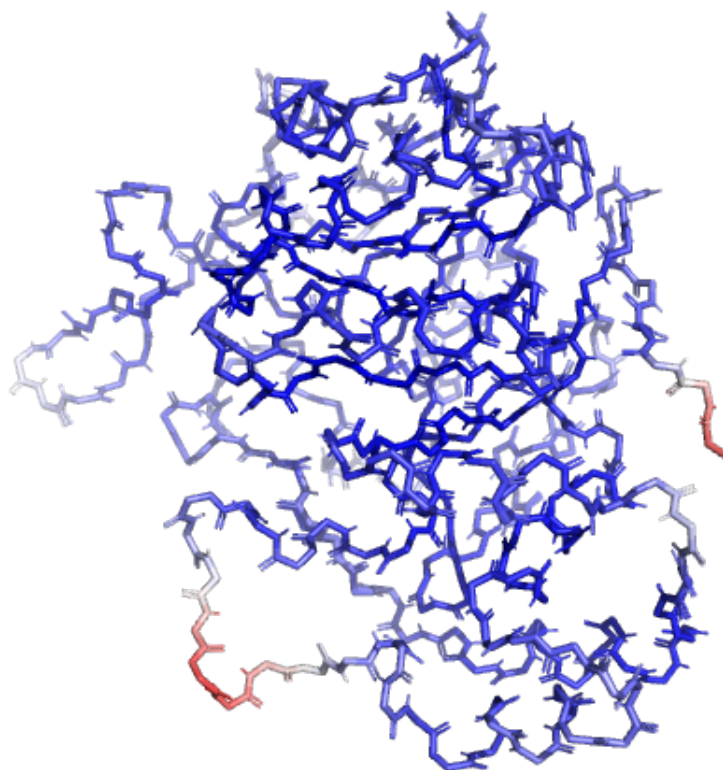
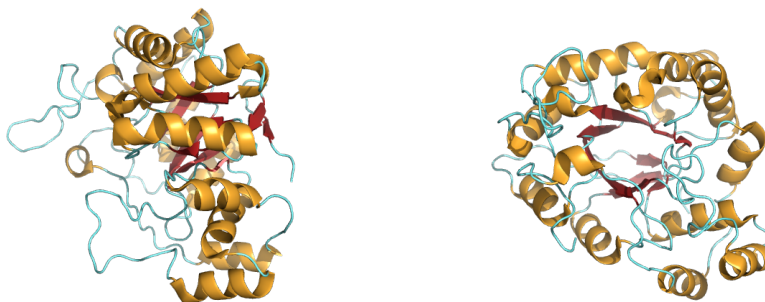


Рис. 2: Покрашенный по В-фактору остов белка бу1р. Атомы с низким В-фактором покрашены синим, атомы с высоким – красным.

Как можно увидеть на Рис. 2, белые и красные участки находятся ближе к периферии белка, в то время как синие структуры - в центре. Самым крас-

ным у рассматриваемой структуры также оказался N-конец, выставленный наружу. Также можно вспомнить, что на самом деле данный белок выглядит как высокоупорядоченная структура из бэга-бочки, обернутой альфа-спиралями, а сверху над этим находятся неупорядоченные структуры (Рис.3).



(a) расположение молекулы как на рис.  
2

(b) вид сверху

Рис. 3: Строение белка бу1р. оранжевым цветом покрашены альфа-спирали, красным - бэга-слои, неупорядоченные участки оставлены светло-голубым цветом.

Итого, получилось что у неупорядоченных и находящихся на поверхности белка (таким образом, самых подвижных) структур самый высокий В-фактор, а у упорядоченных структур и внутри белка - самый низкий. Это вполне логично, ведь чем больше В-фактор, тем более "размыт" колокол электронной плотности атома в пространстве, то есть его положение в молекуле не определено точно, а он подвижен. Понятно, что наиболее подвижные атомы находятся в неупорядоченных областях и на краях белка.

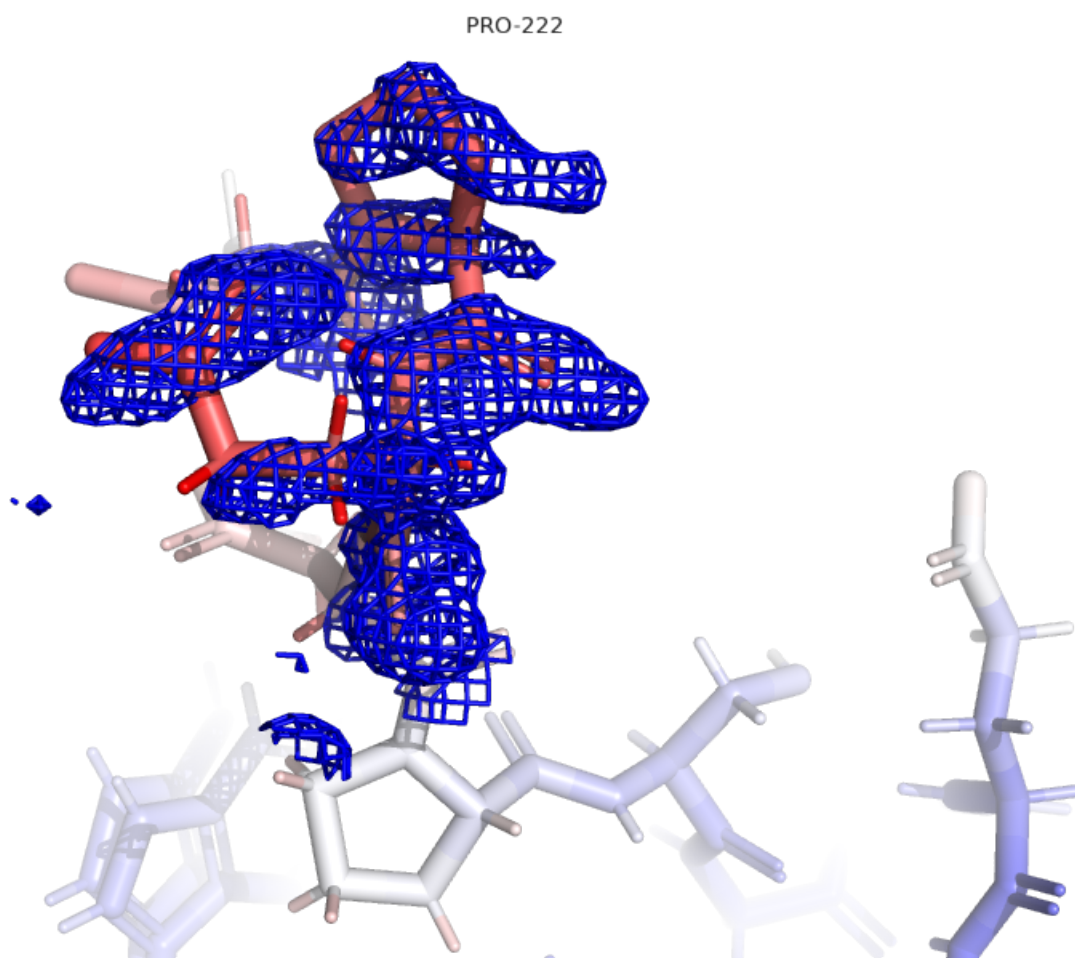


Рис. 4: Покрашенный по B-фактору PRO'222 и GLU'223 белка бу1р. Электронная плотность с уровнем подрезки 3

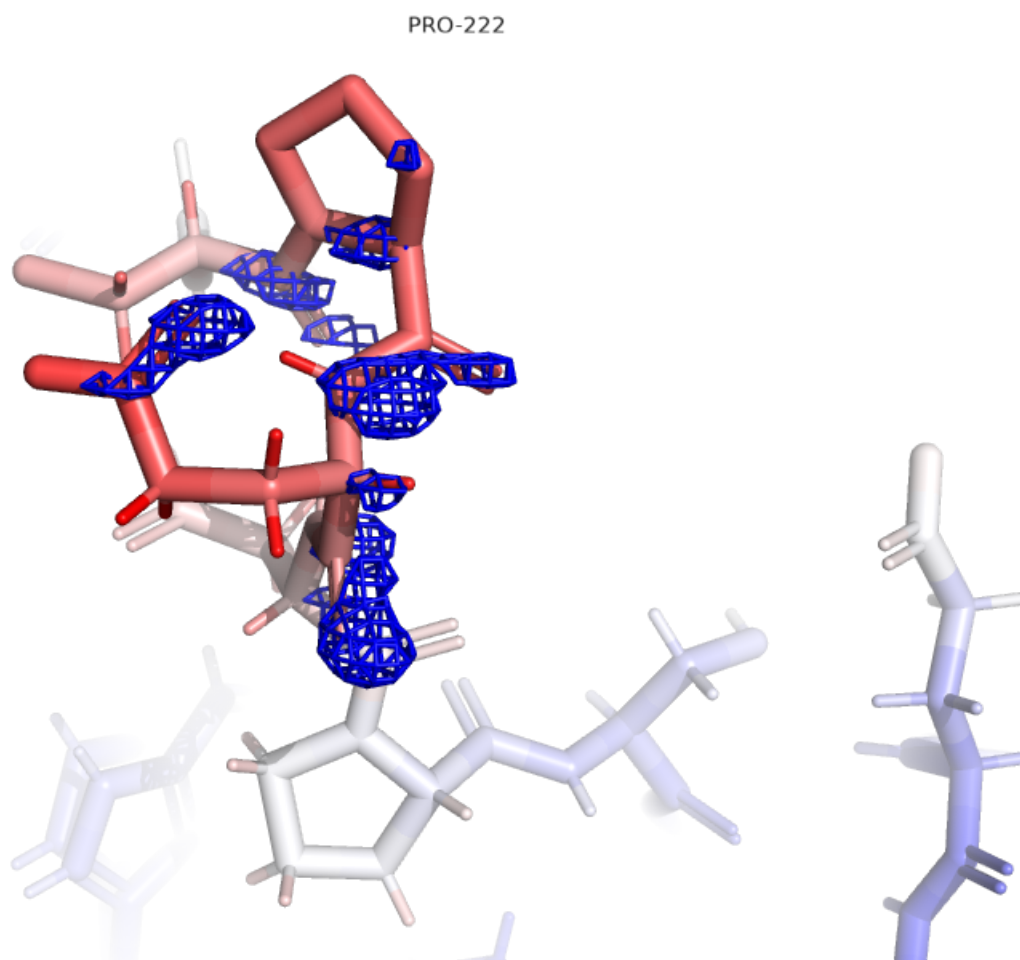


Рис. 5: Покрашенный по B-фактору PRO'222 и GLU'223 белка бу1р. Электронная плотность с уровнем подрезки 2

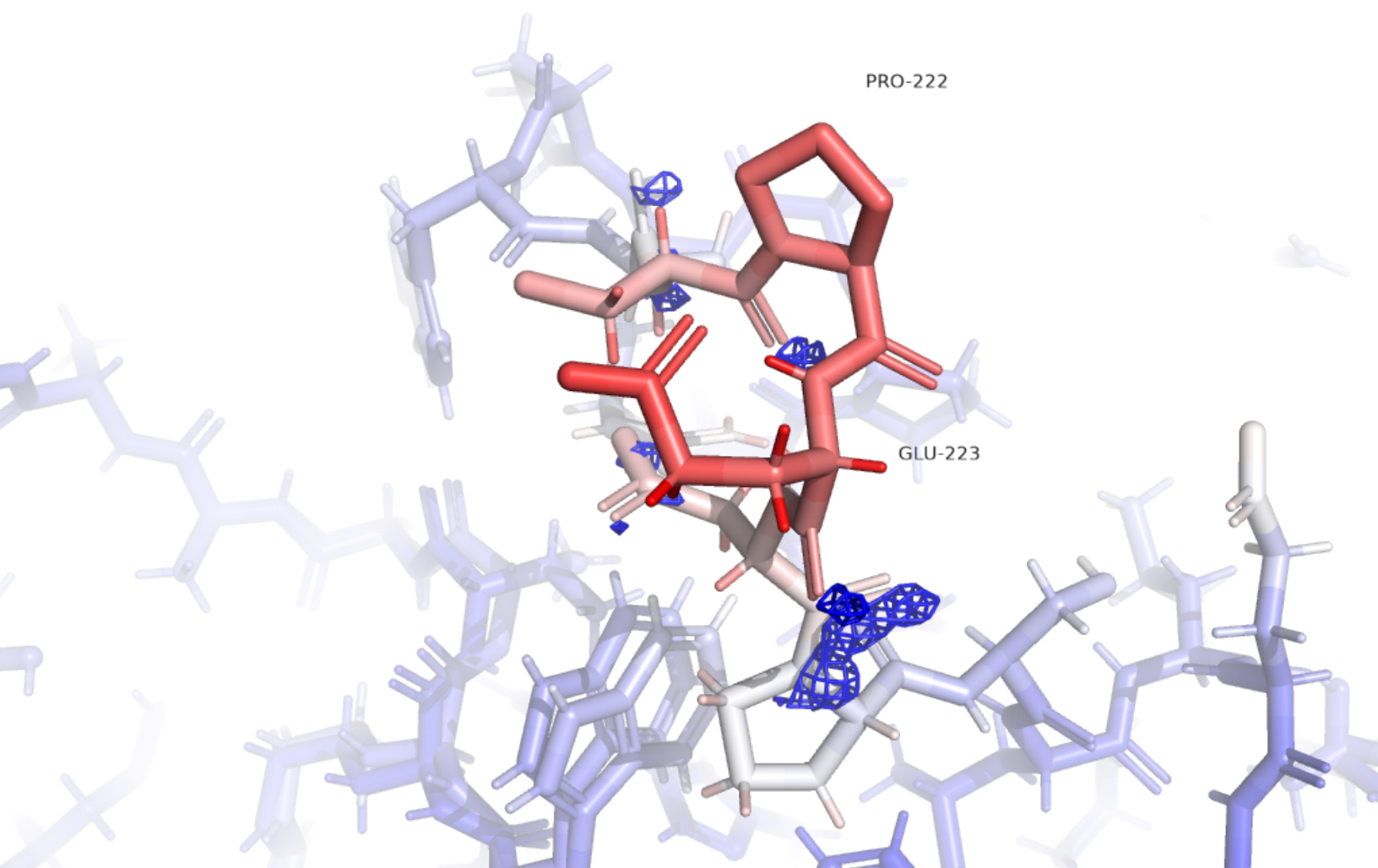


Рис. 6: Покрашенный по B-фактору PRO'222 и GLU'223 белка бу1р. Электронная плотность с уровнем подрезки 1. Электронная плотность на этом рисунку добавлена для двух рядом находящихся аминокислот, потому что для исследуемых остатков ее практически не было для данного уровня подрезки.

Увеличение B-фактора к концу бокового радикала говорит нам об остат-

ке, что его боковая группа подвижна - она может непрерывно менять свое положение, находясь в составе белка, и поэтому определить точно местоположение ее атомов невозможно. Мы видим это также из карт электронной плотности. На высоком уровне подрезки облака электронной плотности вытянутые - то есть возможных положений атомов возможно много. В то время как на уровне подрезки 1 мы перестаем видеть электронную плотность - то есть точных и "сконцентрированных" то есть высоковероятных положений у атома нет - он с равной вероятностью оказывается "размазан" по достаточно большому объему.

### 3 Соседи

Оказывается, что кристал моего белка выглядит так

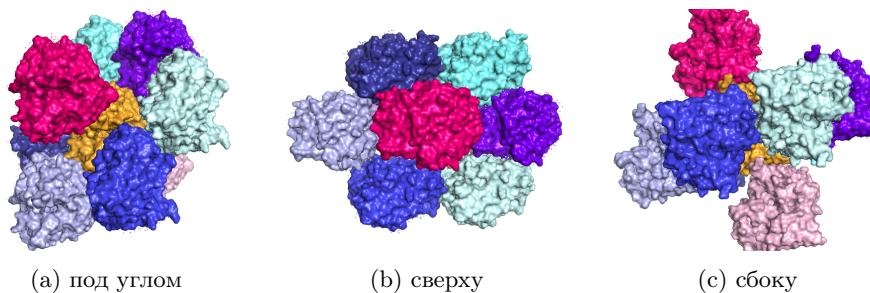


Рис. 7: Соседние ячейки в кристаллической структуре белка бу1р. Оранжевым покрашена центральная ячейка.

То есть с боков белок окружен еще бью молекулами, а сверху и снизу контактирует еще с двумя молекулами. Итого 8 контактов.

Белок не является симметричным, поэтому каждая зона будет уникальной. Я думаю, что олигомеризоваться белок с помощью данных контактов не будет. По сути, белок бу1р - глобулярный, получающийся кристалл укладывает глобулы в слои (соседи из соседних слоев показаны оттенками розового, соседи из одного слоя - оттенками голубого, синего, фиолетового).

Я не рассматривала всех зон контакта, а рассмотрела 2. Одну - между молекулами, расположившимися в одной плоскости слоя кристалла.

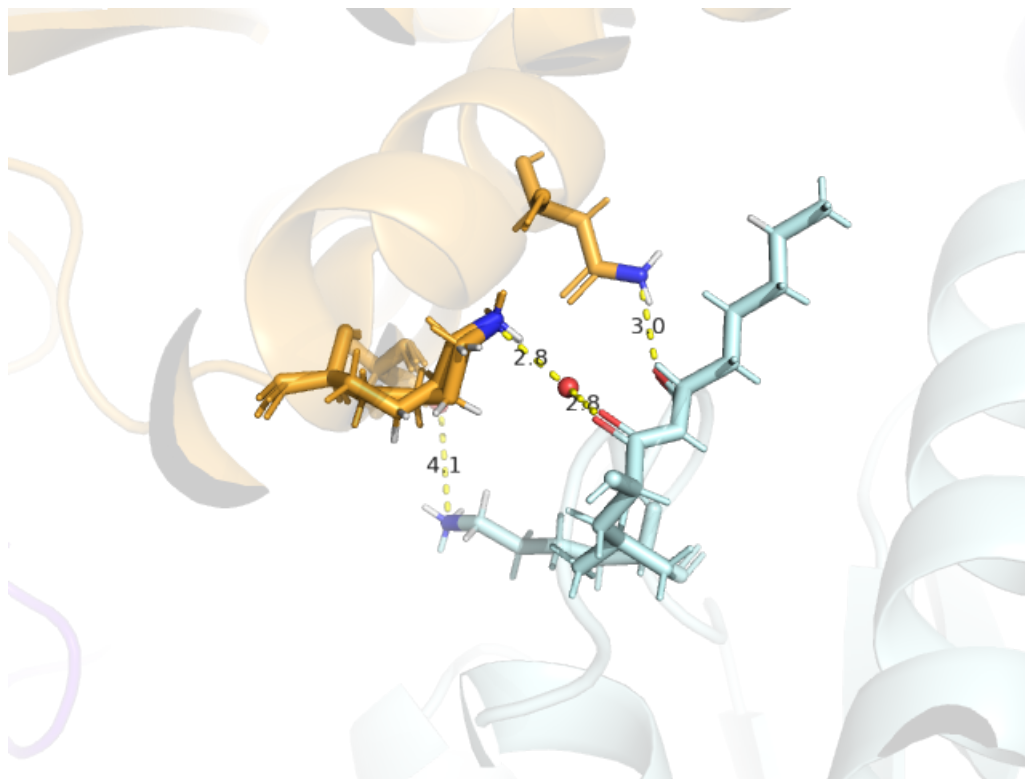


Рис. 8: Возможные взаимодействия в зоне контакта между молекулами в одном слое кристалла

Я смогла определить 2 достаточно далеких водородных связи и 1 связь через молекулу воды. Итого, можно считать, что этот контакт образуется примерно 3 водородными связями.

Еще один был рассмотрен контакт (картинка не приведена изза технических неполадок) между слоями и в нем картина была похожая - около 3-4 водородных связей с участием воды.



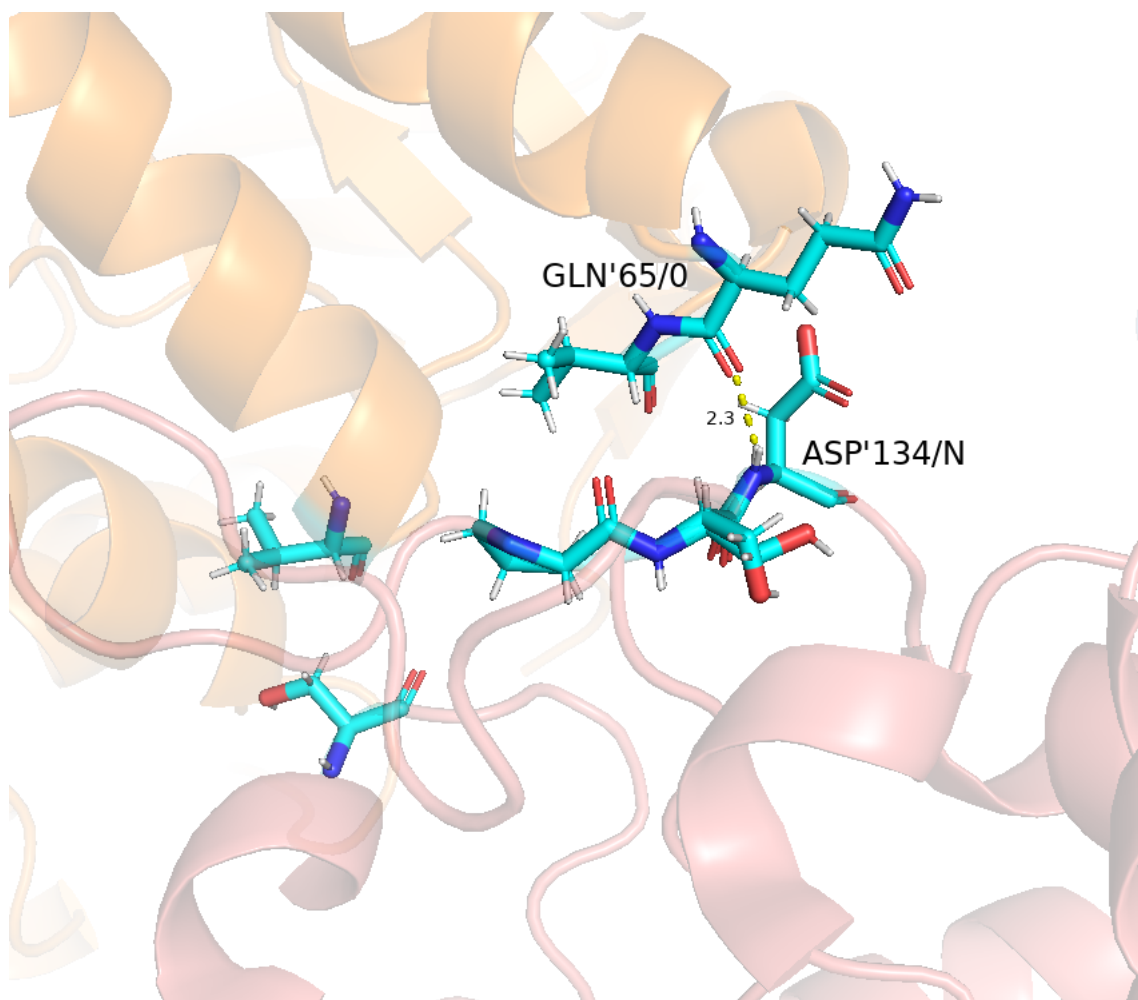


Рис. 9: Возможные взаимодействия в зоне контакта между молекулами в разных слоях кристалла

В контакте между слоями получилось обнаружить 1 водородную связь. На заднем плане видно еще одну пару близко расположенных остатков, но связей между ними найти не удалось.

Известно, что в принципе межмолекулярные контакты в кристалле могут поддерживаться не только водородными связями, но и солевыми мостиками. Я думаю, что наверняка возможно слипание немного гидрофобных участков.

В рассматриваемом белке хоть и были найдены только водородные связи, интересно то, что внутри слоя межмолекулярный контакт поддерживается 2-3-4 связями, в то время как молекулы между слоями связаны 1-2 водородными связями. Это может означать, что структура кристалла сло-

истая и не очень прочна.