

## Практикум № 2. Электронная плотность

### 1 ЭП: хорошая и плохая расшифровки.

В структуре 6Y1P больше молекул воды вокруг белка. У 6Y1P больше лигандов. Вообще белок выглядит как бочонок из бета-листов, обернутый альфа-спиралями, а сверху на этом "корже" лежат лиганды и сверху это закрыто "шапкой" неупорядоченных цепей. Ход неупорядоченных петель немного отличен, но понять, в какой структуре он верный - сложно в представлении 'cartoon'. В целом положение элементов вторичной структуры совпадает, и только руководствуясь тем, что молекулы воды проставлены честно, можно предположить, что структура 6Y1P разрешена немного лучше, чем 1EI.

Интересно, что у белков разные кристаллические ячейки. Возможно, что и сами кристаллы немного отличаются

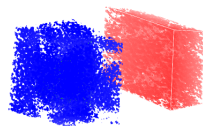


Рис. 1: Кристаллические ячейки структур. Красная - 1EI, очень смещенный параллелипипед. Синее - 6Y1P, ячейка близка к кубу

Я в итоге взяла тот самый регион в "шапке" из неупорядоченных цепей, и на них отличия видны очень хорошо. Действительно, кажется, что структура в 6Y1P разрешена гораздо лучше - каждый атом остова четко виден на карте электронной плотности. Более того, для некоторых остатков удалось предсказать два возможных расположения цепи (Рис.3). В структуре 1EI карта электронной плотности выглядит гораздо более "рваной" (Рис.2). Некоторые азоты остова вообще не имеют вокруг себя никакой электронной плотности. Так что можно сделать вывод, что структура 6Y1P сделана с большим разрешением, или же в кристалле данная неупорядоченная область закристаллизовалась лучше.

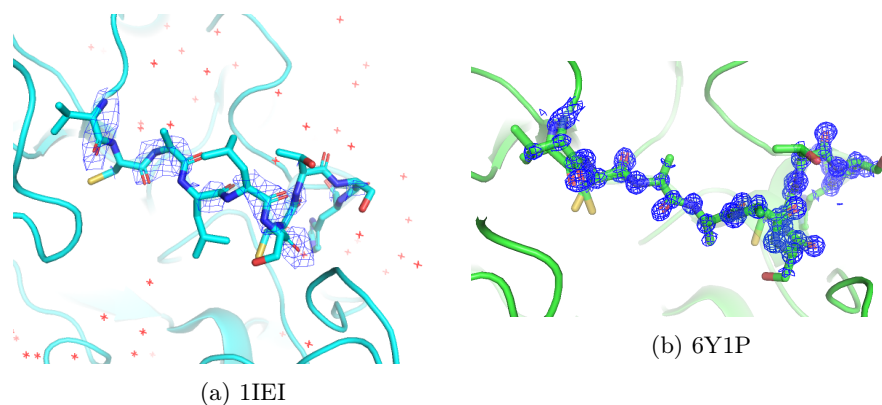


Рис. 2: Электронные плотности участка цепи с 297 остатка по 306 в PDB 1IEI и 6Y1P. Белки немного отличаются по последовательности, в 1IEI (голубой) VCAAASCTHK, а в 6Y1P (зеленый) - VCALLSCTSHK)

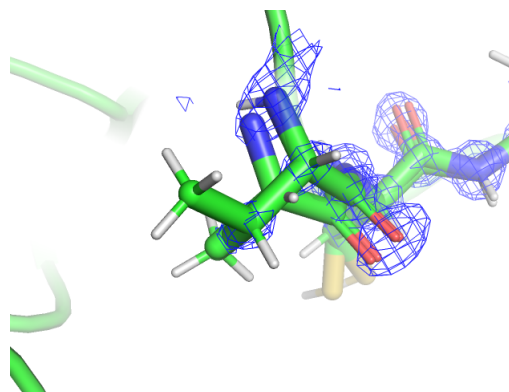


Рис. 3: Валин 297 в 6Y1P. Видно, что расшифровано 2 возможных положения цепи

Теперь достанем из PDB интересующую нас информацию.

Характеристика	1IEI	6Y1P
Resolution	2.50 Å	0.94 Å
Number of reflections	9340	193134
Symmetry operators for space group	P 1	P 1 21 1
Year	2001	2020

Как и предполагалось, структура 6Y1P сделана с большим разрешением. Правда и год публикации у этой структуры - 2001!

Также интересно, что, как и предполагалось, структуры кристаллов разные (у них разные симметрии), и условия кристаллизации были разными!

## 2 ЭП и положение в структуре.

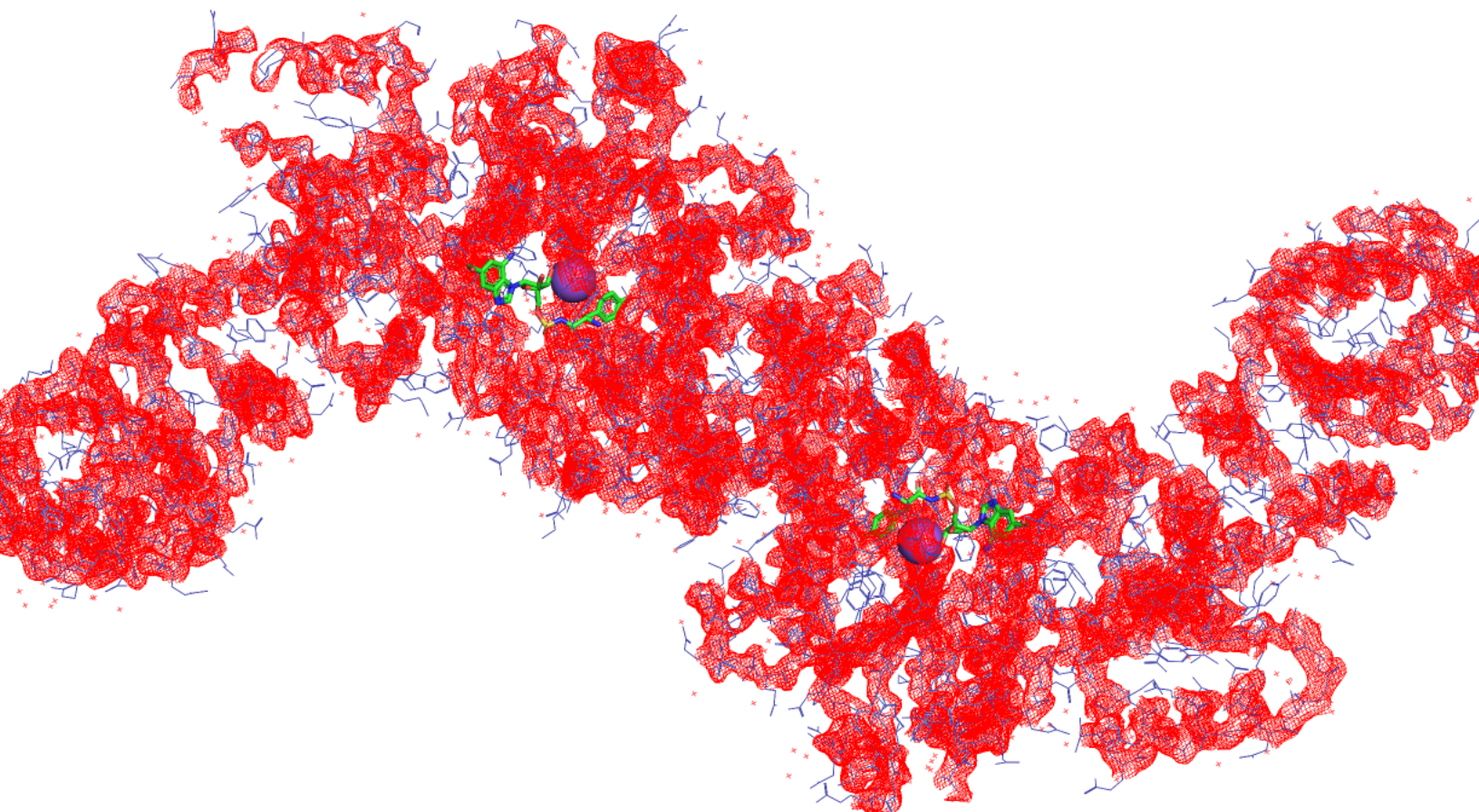


Рис. 4: Уровень 1

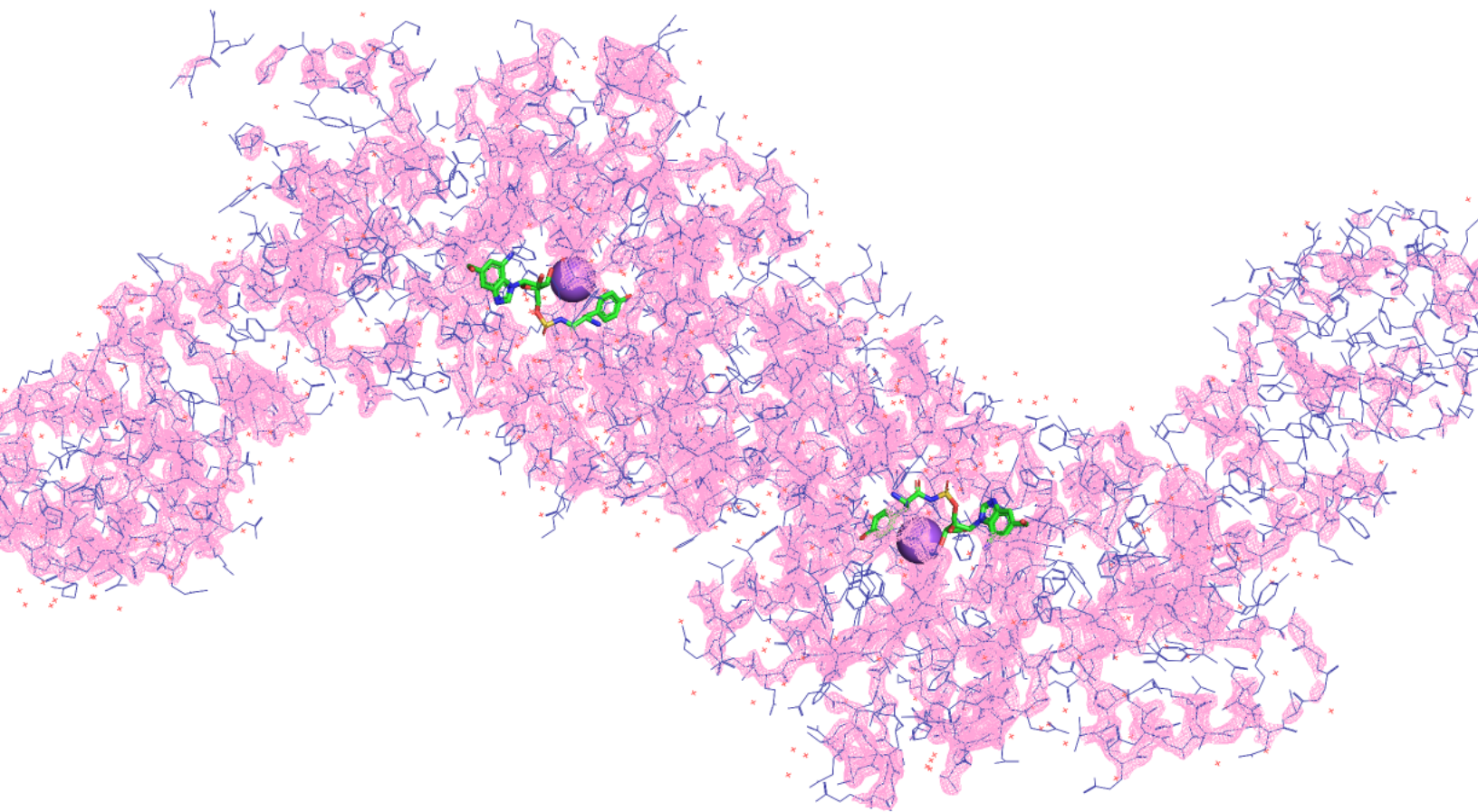


Рис. 5: Уровень 2

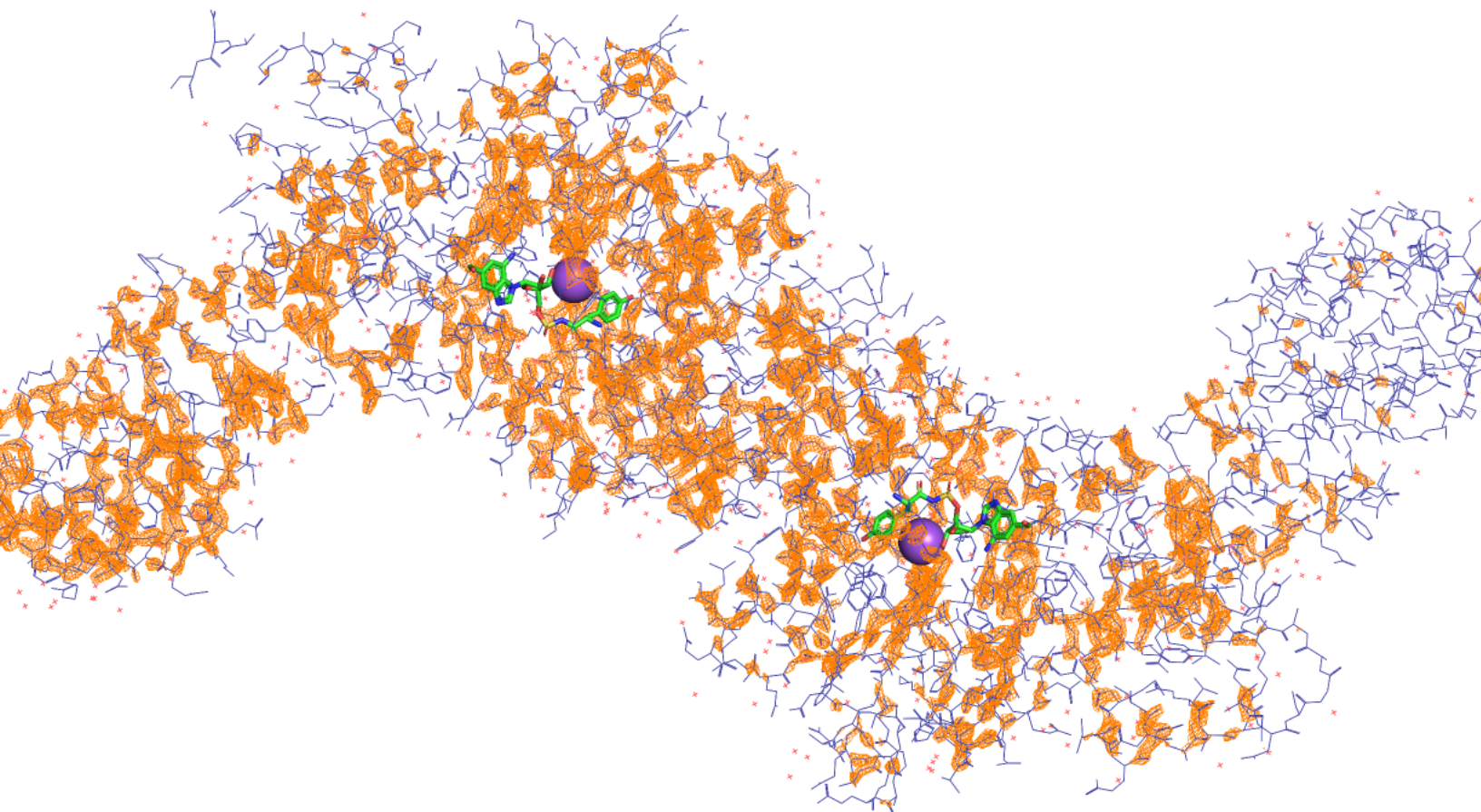


Рис. 6: Уровень 3

Если смотреть целиком на весь белок, то видно, что плотность исчезает по краям белка. Это может объясняться тем, что в центре белка атомы более плотно упакованы, и там электроны более стабильно локализованы. По краям может возникать неупорядоченность, края цепи немного "болтаются" и плотность оказывается "размазана" а потому на 3-ем уровне подрезки мы не видим достаточного "сгущения" плотности.

Также видно, что электронной плотности на уровне подрезки 1 почти совсем пропадает для самого провального на картинке домена.

Данный белок - Тирозил-тРНК синтаза, и два симметричных домена играют роль подвижных 'шариков' в структуре белка. тРНК залипает на эти домены, а потом подвижные домены смещаются в сторону основного домена и -ОН конец тРНК оказывается в активном центре фермента и на

тРНК навешивается нужная аминокислота.

Таким образом вполне логично предположить, что в этом домене электроны не локализованы четко - раз домен может находится в разных положениях то и атомы могут располагаться в разных точках пространства и распределение плотности очень широкое.

### 3 ЭП и типы атомов.

Я подумала, что интересно разметить взаимодействия лиганда - ведь логично предположить что вклад в высокий пик распределения ЭП будет вносить зафиксированность атома в пространстве.

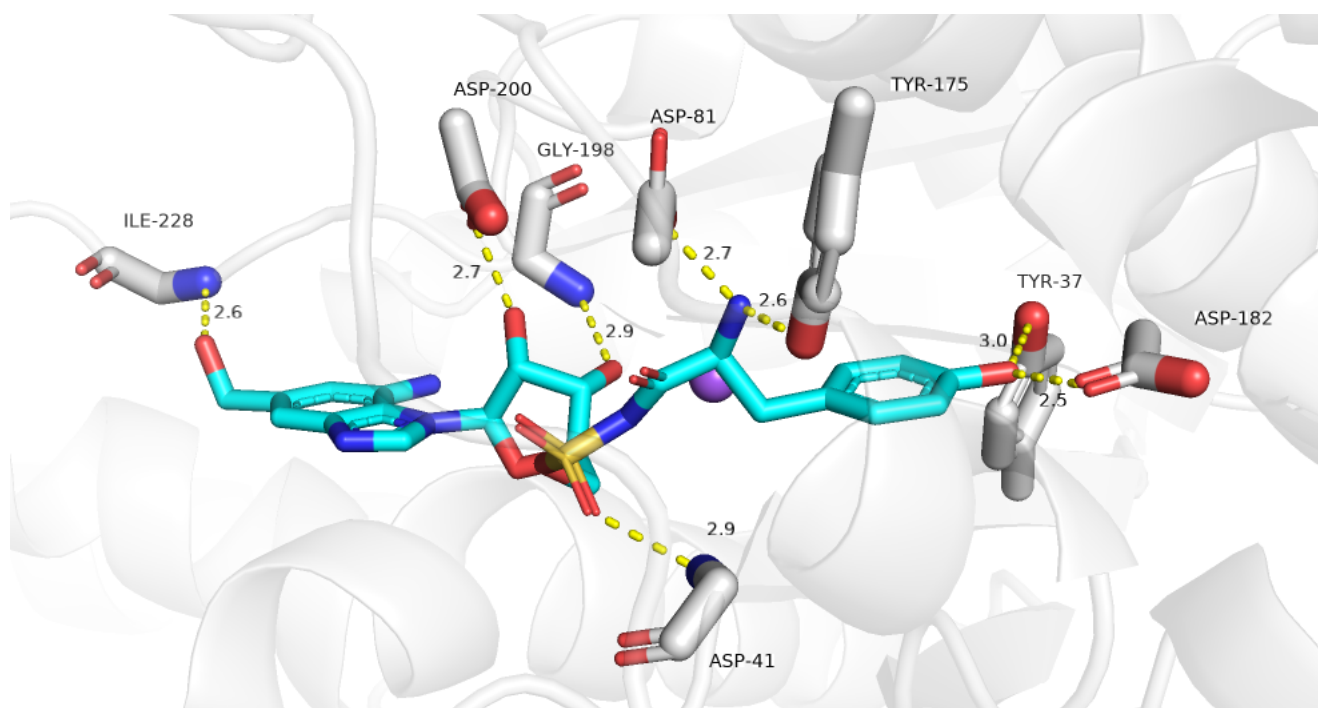


Рис. 7: Предполагаемые взаимодействия лиганда с окружающими аминокислотами. Голубым показан сам лиганд

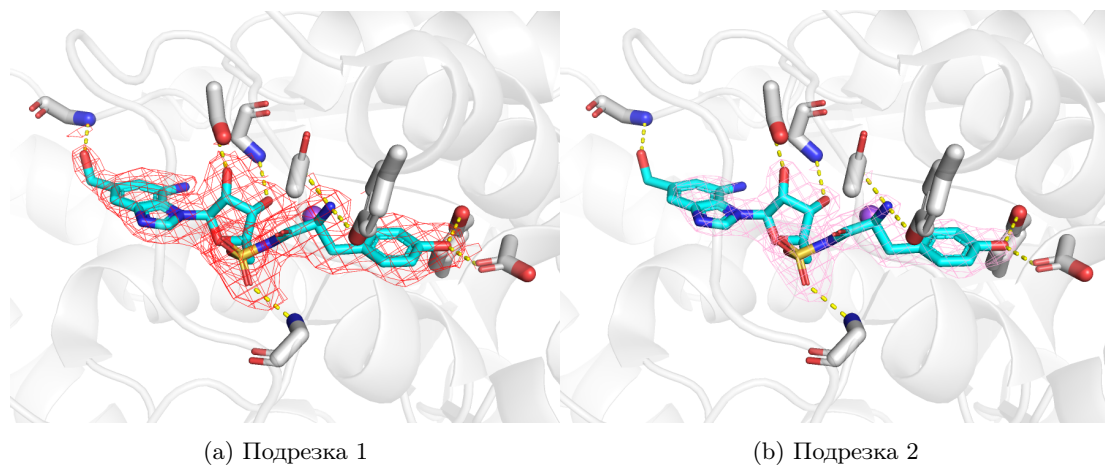


Рис. 8

На уровне подрезки 1 ЭП есть вокруг всех атомов лиганда. На уровне подрезки 2 ЭП пропадает у самых левых атомов - это можно объяснить подвижностью этого края лиганда, так как они находятся у входа в карман связывания.

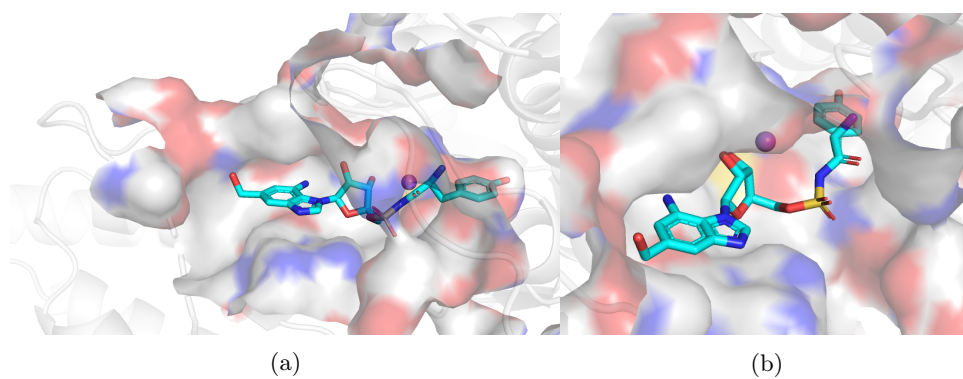


Рис. 9: Карман связывания лиганда показан с помощью surface.

Видно, что самая левая -ОН группа на рисунке высовывается из кармана, поэтому неудивительно, что она может быть подвижна.

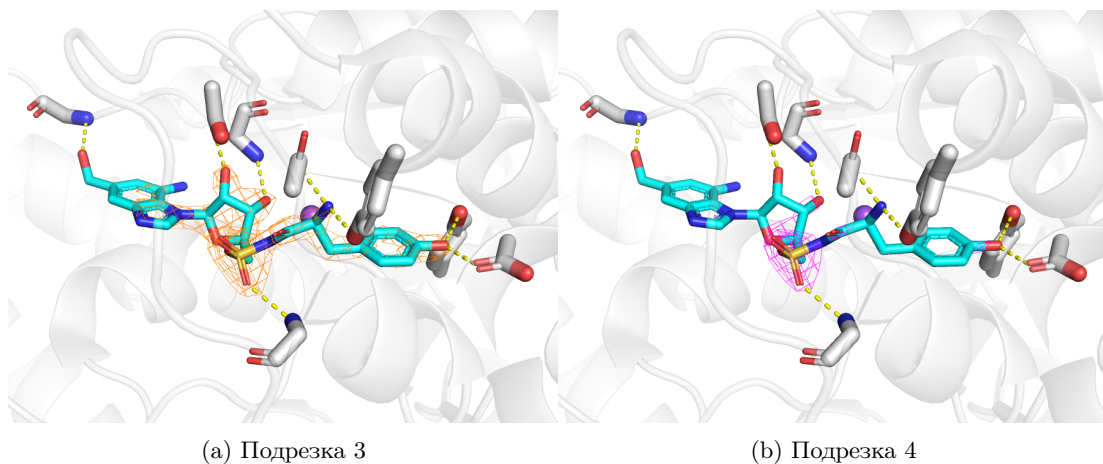


Рис. 10

На уровне подрезки 4 остается в ЭП атом серы и окружающие его кислороды - я думаю, что это результат того, что сера - самый тяжелый в лиганде атом, вокруг нее множество электронов, и поэтому плотность в этом месте долго сохраняется - там высокий пик плотности.