

# Практикум 8

## Задание 1

В этом практикуме я использовала структуру из практикума 6 - 1DMN. Для нее с помощью 2Struc была генерирована аннотация вторичной структуры.

Были выбраны 2 генерации: с помощью DSSP и STRIDE.

В целом, аннотации этих программ похожи, но все же есть некоторые различия в принадлежности таким структурам как, например, альфа-спирали и бета-листы. Давайте их рассмотрим ниже.

1) Смотрим на 108-D, точнее на аспарагиновую кислоту. По выдаче DSSP она не принадлежит бета-листу, а по STRIDE - принадлежит. Посмотрев на структуру подробнее вручную, я увидела, что во-первых, начиная с PHE-107 и до GLN-114 атомы вывернуто (рисунк 2), что нарушило расстояния между ними, соответственно и длины водородных связей, которые должны быть в б-листе. И если 109-111 остатки считаются поворотом по выдаче, но 107,108,112,113 входят в б-лист по DSSP. Поэтому в данном случае я считаю аннотацию STRIDE более верной, так как она говорит, что эти остатки принадлежат чему-то другому, а не бета-листу.

RESNUM	75	85	95	105	115	125										
SEQ	TGPVRASHNGCGAMPFRVEMVWNGQPCALDVIDVMRFDEHGRIQTMQAYWSEVNL SV															
CONSENSUS	i 0X00	EE	XXXX	EEEEEEEEEEEE	TT	EEEEEEEEEEEE	X	TT	XX	EEEEEEEE	00	GG	GEE	0		
DSSP	i 0S00	EE	0	SS	EEEEEEEEEEEE	TT	EEEEEEEEEEEE	0	TT	S	0	EEEEEEEE	00	GG	GEE	0
STRIDE	i CCCC	EE	TTTT	EEEEEEEEEEEE	TT	EEEEEEEEEEEE	TT	TT	EEEEEEEE	CC	GG	GEE	CC			

Рис.1 Участок выдачи 2Struc.

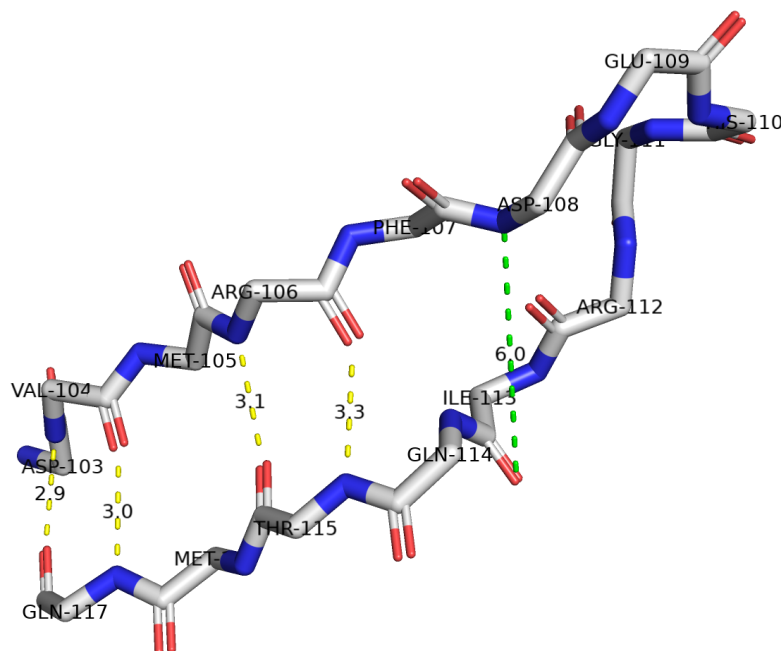


Рис. 2. Бета-лист, предпологаемо содержащий ASP-108 и ARG-112. (желтым- «хорошие» водородные связи, зеленым- нарушенная поворотом кислорода в другую сторону)

2) Аналогично для 112-R. Из-за того, что ILE-115 развернуло, то это мешает, и аргинин тоже не может образовать связи с нужным остатком (рисунки 2).

### 3) Альфа спираль и остаток 49-G

DSSP относит его к спирали, STRIDE не относит. Я может быть тоже отнесла бы остаток глицина к альфа-спирали, так как длина водородной связи соответствует допустимым значениям, а также на каждый виток приходится 3,6 аминокислотного остатка, шаг винта (т.е. минимальное расстояние между двумя эквивалентными точками) между GLY-49 и ILE-53 составляет 5.5Å. Но, углы  $\phi$  и  $\psi$  сильно не соответствуют значениям торсионных углов альфа спирали (примерно  $-60^\circ$ ,  $-45^\circ$ ) (рисунки 4), поэтому я склоняюсь к тому, что этот остаток все же не входит в спираль, и соглашаюсь с STRIDE.

RESNUM	22	32	42	52	65		
SEQ	ARYIELVDVGDIEAIVQMFADDATVEDPFGQPPIHGREQIAAFFRQGLKVRACLTGP'						
CONSENSUS	i HHHHHHHH	XOHHHHHHXX	EEEEEEEEEX	TTXOOEE	XHHHHHHHHHHH	XOHEEEEEOXO	
DSSP	i HHHHHHHHT	OHHHHHTT	EEEEEEEE	SSTTT	SOOEE	HHHHHHHHHHH	HOSEEEEEOS
STRIDE	i HHHHHHHH	CCHHHHHHC	EEEEEEEE	TTTTT	CCEEC	HHHHHHHHHHH	CCCEEEEECC

Рис. 3. Участок выдачи 2Struc.

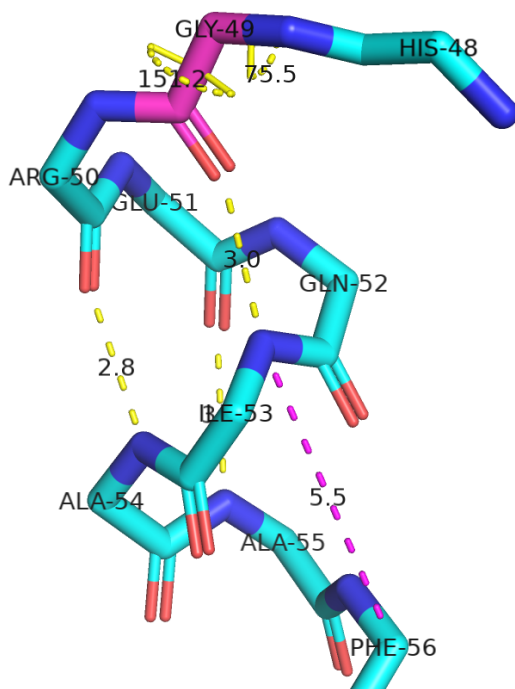


Рис. 4. Участок альфа-спирали. Розовым-рассматриваемый остаток GLY-49. Желтый пунктир- водородные связи, розовый- расстояние между витками. Также желтым- торсионные углы.

## Задание 2

Мне был выдан набор из 30 белков и для каждого из них я сгенерировала разметку вторичной структуры с помощью DSSP.

С помощью python были рассчитаны склонности каждого типа аминокислоты образовывать тот или иной тип вторичной структуры (amino acid secondary structure propensity) по следующей формуле:

$$P_{ik} = (n_{ik}/n_i) / (N_k/N)$$

Где  $P_{ik}$  -это propensity аминокислотного остатка  $i$  образовывать тип вторичной структуры  $j$

$n_{ik}$  -это количество остатков  $i$  в датасете, образующих тип вторичной структуры  $j$

$n_i$  -это общее количество остатков  $i$  в датасете

$N_k$  -это общее количество остатков, образующих тип вторичной структуры  $j$  во всем датасете

$N$  -это общее количество остатков в датасете

Таб. 1. Склонности к образованию типов структур (бета-лист ('E') , альфа-спираль ('H'), петля ('C'))

	Н	Е	С
A	1.442494	0.843170	0.792581
C	0.754509	1.699654	0.838963
D	0.733869	0.584790	1.354388
E	1.372226	0.608190	0.942646
F	0.945210	1.291737	0.902953
G	0.499007	0.747414	1.428702
H	0.708907	1.061802	1.155094
I	1.020506	1.876615	0.592034
K	1.191471	0.530270	1.091364
L	1.284826	1.223073	0.720456
M	1.331886	0.898704	0.837068
N	0.882196	0.520480	1.290151
P	0.313577	0.284235	1.753990
Q	1.300346	0.693335	0.949447
R	1.292873	0.954485	0.836447
S	0.776163	0.780720	1.239504
T	0.840398	0.930110	1.131805
V	0.847792	1.966134	0.660237
W	1.526877	1.064618	0.639744
Y	0.947764	1.546094	0.786712

Рассмотрим несколько случаев на примерах.

В спиральных чаще всех встречается аланин, в бета-листах лидер по встречаемости валин. Это можно объяснить тем, что наличие неполярных боковых групп, видимо, характерно для бета-структур, в которых в целом вообще есть гидрофобные взаимодействия. Петли чаще всего образует глицин. Глицин действительно может быть склонен к образованию петель, ведь у него есть водородный радикал, а его можно назвать достаточно «гибким».