

# Практикум 9

Мне была дана структура A0A5F5XTT2 (<https://www.uniprot.org/uniprot/A0A5F5XTT2>). Это белок подсемейства А калиевых потенциалзависимых каналов. Фермент выделен из домашней кошки.

После поиска в Blast были выданы находки с высоким процентом идентичности. Так как в PDB не нашлось нашей структуры, для работы я выбрала вариант с одним из самых высоких значений идентичности с accession 2A79\_B- Mammalian Shaker Kv1.2 potassium channel- beta subunit complex. (<https://www.rcsb.org/structure/2a79>). Этот белок выделен из серой крысы.

Для удобства я покрасила все цепи в разные цвета. Фиолетовым показан калиевый канал.

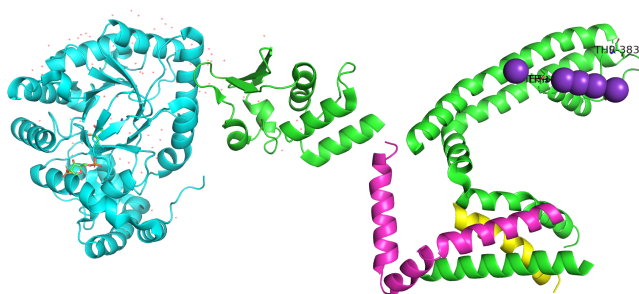


Рис 1. Общая структура.

## THR-383

Видим, что он находится у поверхности белка и ни в каких взаимодействиях не участвует. После мутагенеза и скульптурирования (значение strain=23, структура вероятнее всего спокойно релаксирует) в целом ничего в структуре не меняется, только показалось возможным появление связи между ним и аргинином 354, но измерив видим, что расстояние все еще большое.

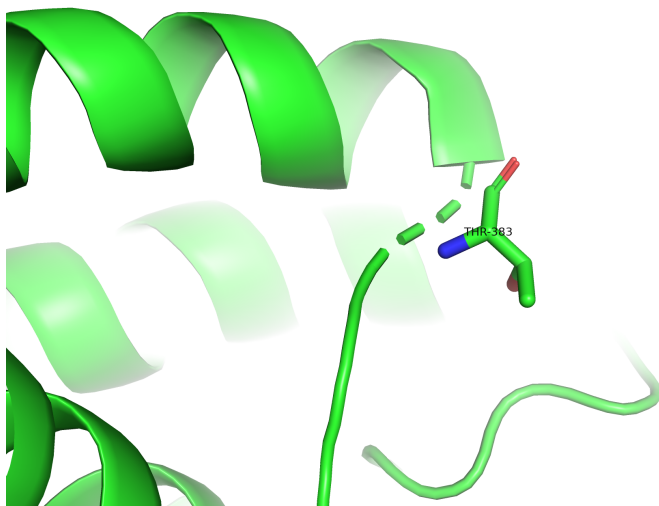


Рис 2. Треонин-383 до мутации.

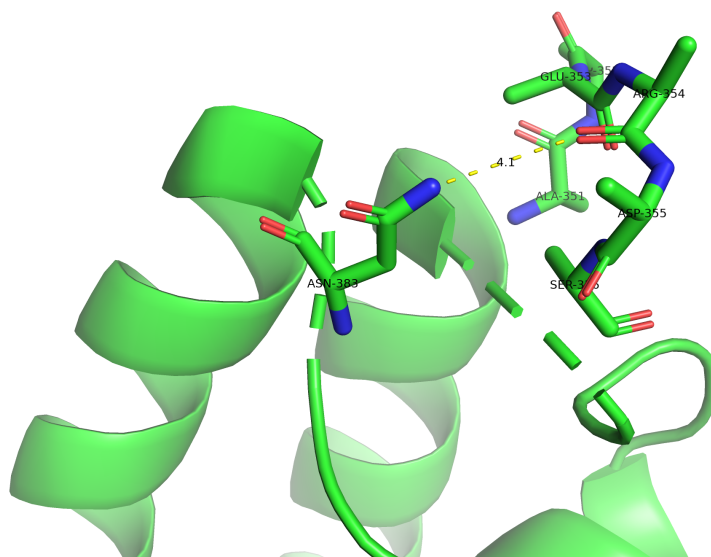


Рис 3. Треонин изменился в аспарагин. После мутагенеза и скульптурирования.

### **MET-372**

Метионин не так близко к селективному фильтру калиевого канала., боковой цепью отвернут, поэтому на него он вероятно не будет влиять.

После мутагенеза и скульптурирования (значение strain=24, структура вероятнее всего спокойно релаксирует) поменял положение аланин и глицин в соседней петле, они приблизились к цистеину, а треонин наоборот оттолкнулся. В целом замена не несет в себе сильных последствий, кроме небольшого сдвига остатков.

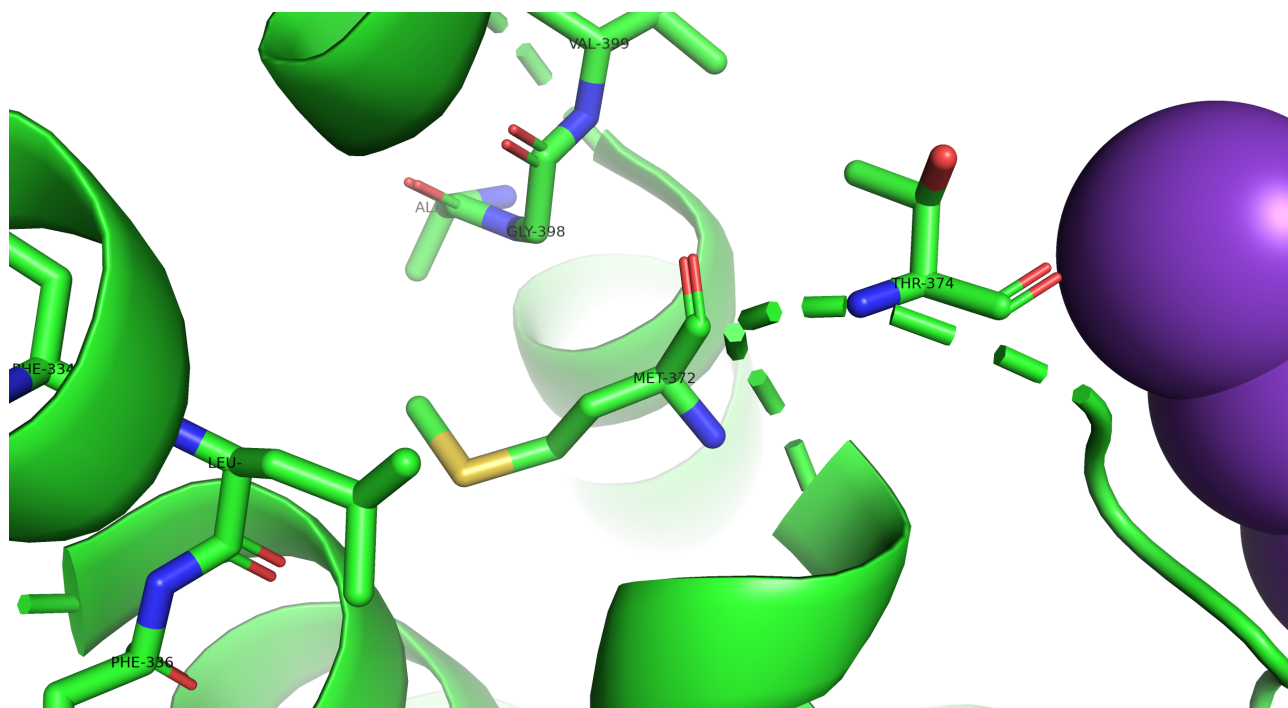


Рис 4. Метионин-372 до изменений.

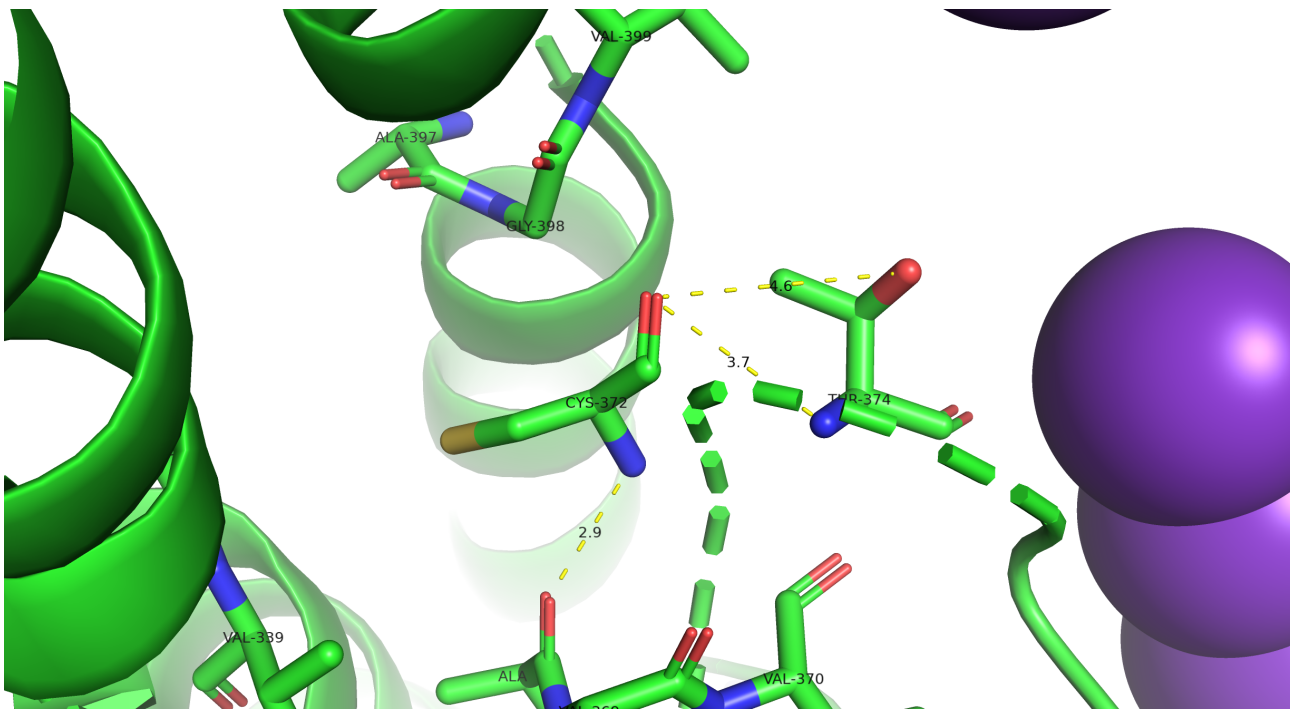


Рис 5. Метионин заменен на цистеин и проведено скульптурирование.

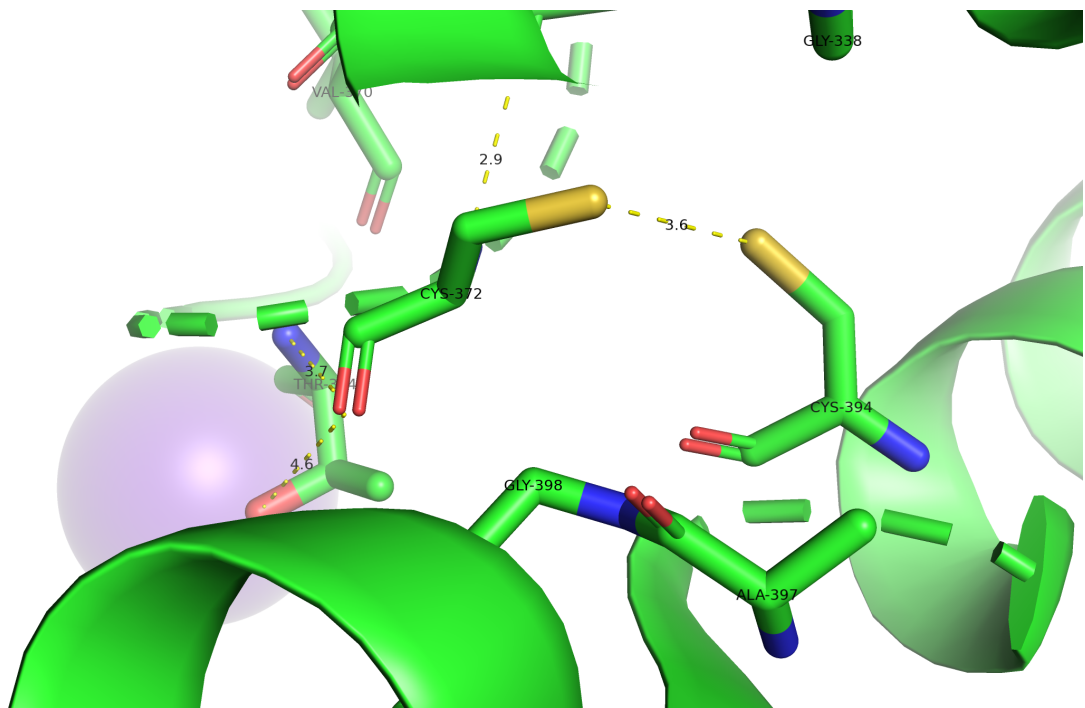


Рис 5.1. Между цистеином 372 и 394, в результате сближения, образовался дисульфидный мостик.

#### THR-374

Треонин находится очень близко к калиевому каналу, обращен к нему боковой группой. Ожидаем, что при его (гидрофильной ак) замене на изолейцин (гидрофобную ак), возможна

потеря функциональности белка. После мутагенеза и скульптурирования (значение strain 94, очень большое) происходит отталкивание ионов калия.

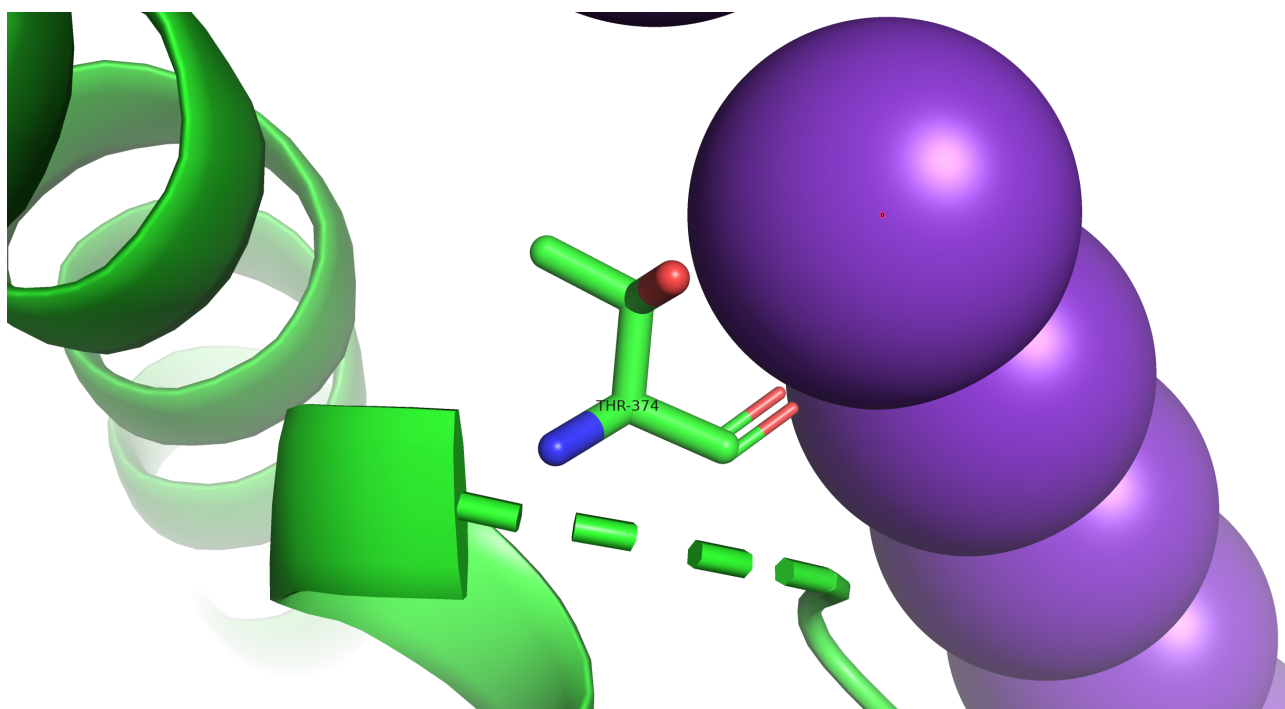


Рис 6. Треонин-374 до изменений. Фиолетовым- калиевый канал.

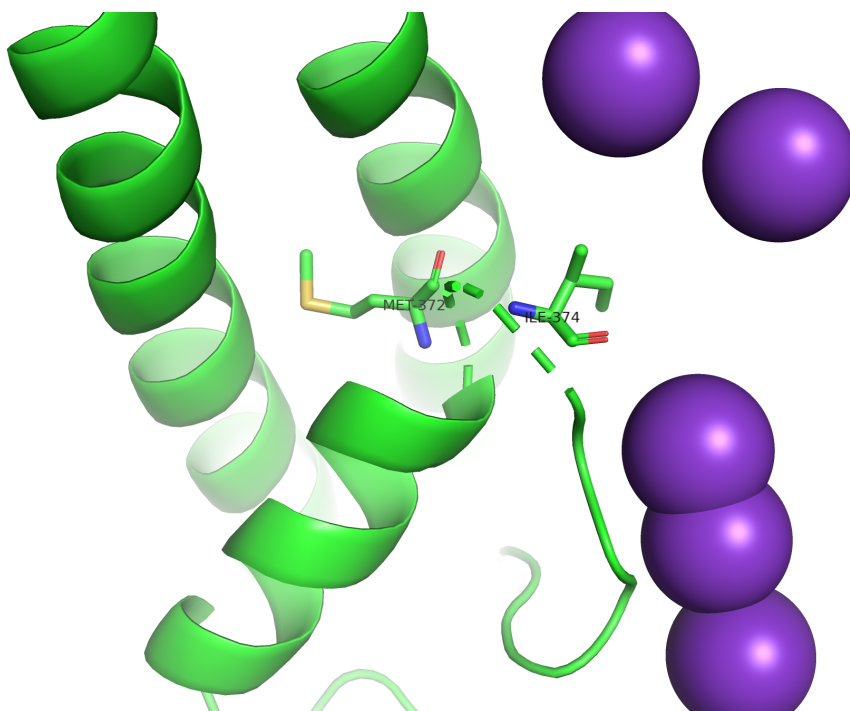


Рис 7. Треонин заменен на изолейцин. Видим, что ионы калия отталкиваются.