

# Определение вторичной структуры

Для выполнения этого задания был взят белок [6TEN](#). На рисунке один показана его структура. Розовый –  $\alpha$ -спирали, желтый –  $\beta$ -тяжи.

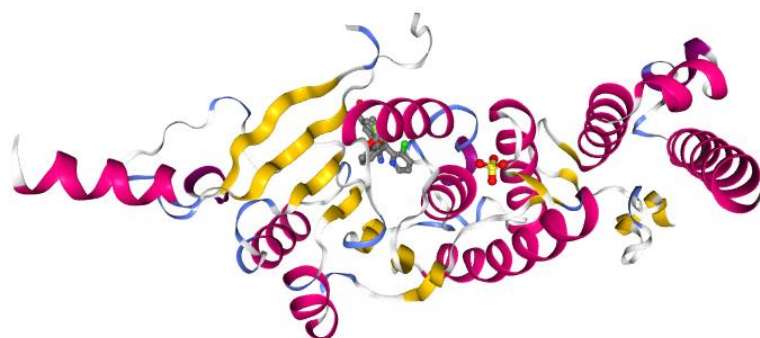


Рисунок 1. Структура 6TEN

Далее с помощью программы [Stride](#) были найдены вторичные структуры белка.

На рисунке 2 показана визуализация данного сервиса:  $\beta$ -тяжи - зеленый цвет,  $\alpha$ -спирали – красный. Так же был получен [тестовый файл](#).

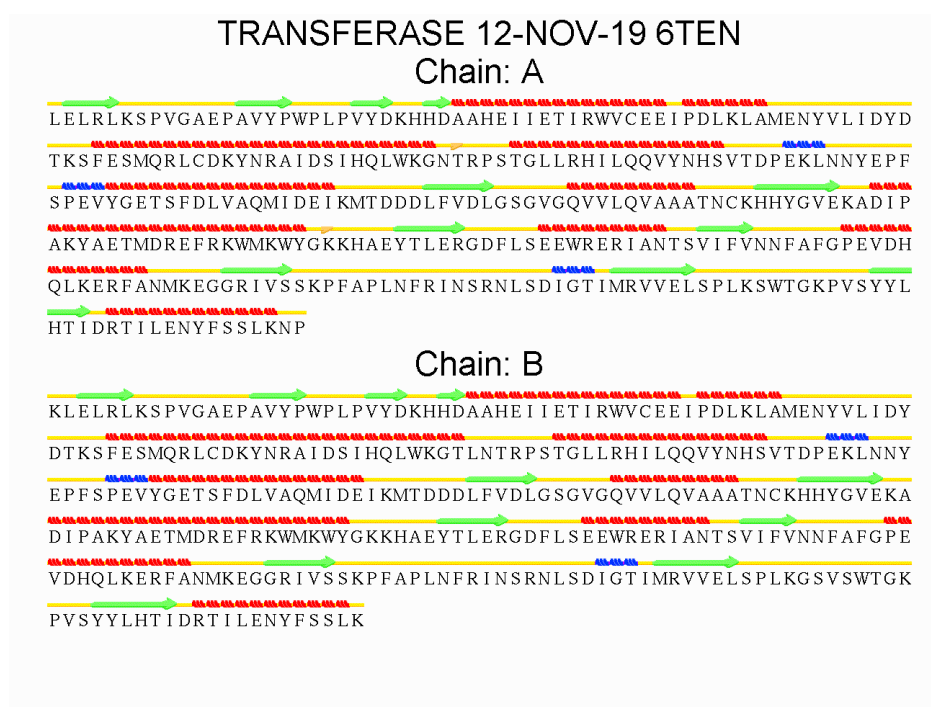


Рисунок 2. Выдача программа Stride

Данные PDB:

```
HELIX 1 AA1 ASP A 32 ILE A 48 1 17
HELIX 2 AA2 ILE A 48 MET A 55 1 8
```

```
SHEET 1 AA1 2 GLU A 6 LEU A 9 0
SHEET 2 AA1 2 ALA A 18 PRO A 21 -1 O TYR A 20 N LEU A 7
```

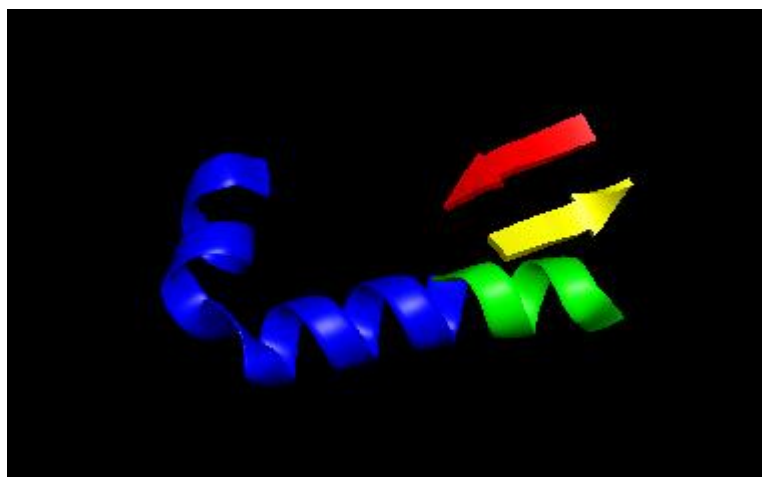


Рисунок 2. Элементы вторичной структуры. Синий - `HELIX 1 AA1 ASP A 32 ILE A 48`, зеленый - `HELIX 2 AA2 ILE A 48 MET A 55`, красный - `SHEET 1 AA1 2 GLU A 6 LEU A 9`, желтый - `SHEET 2 AA1 2 ALA A 18 PRO A`

Сравнении положений  $\alpha$ -спиралей и  $\beta$ -тяжей, которые представлены в PDB и выдает [Stride](#).

Таблица 1. Положения структур в PDB и Stride.

	PDB	Stride
$\alpha$ -спирал	ASP A 32 - ILE A 48	ALA 33 A - GLU 47 A
$\alpha$ -спирал	ILE A 48 - MET A 55	PRO 49 A - ALA 54 A
$\beta$ -тяж	GLU A 6 - LEU A 9	GLU 6 A - LEU 9 A
$\beta$ -тяж	ALA A 18 - PRO A 21	ALA 18 A - PRO 21 A

Подводя итоги, отмечу, что в случае  $\beta$ -тяжей границы полностью совпадают, в то время как для  $\alpha$ -спиралей программа Stride "стирает" по одной аминокислоте с обоих концов. Думаю, что это связано с тем, что для обозначения вторичных структур алгоритм использует водородные связи, которые могут быть неверно определены из-за погрешностей PCA.

Я больше верю аннотации PDB так как она была составлена специалистами, которые могли учесть нюансы этой структуры.