

PyMOL и электронная плотность

Задание 1.

Для работы была дана структура с идентификатором белка в банке данных PDB: 5RE8, полученная в ходе работы консорциума PanDDA над способами связывания низкомолекулярных фрагментов с главной протеазой коронавируса Sars-COV-2. На данной картинке я хотела показать взаимодействие лиганда ToV с двумя аминокислотными остатками протеазы. Я предполагаю, что в этой структуре мы наблюдаем водородные связи между восьмым атомом азота лиганда и основными атомами кислорода как пролина 96, так и треонина 98 (расстояние меньше 3 ангстрем). Результат работы показан на рисунках 1 и 2.

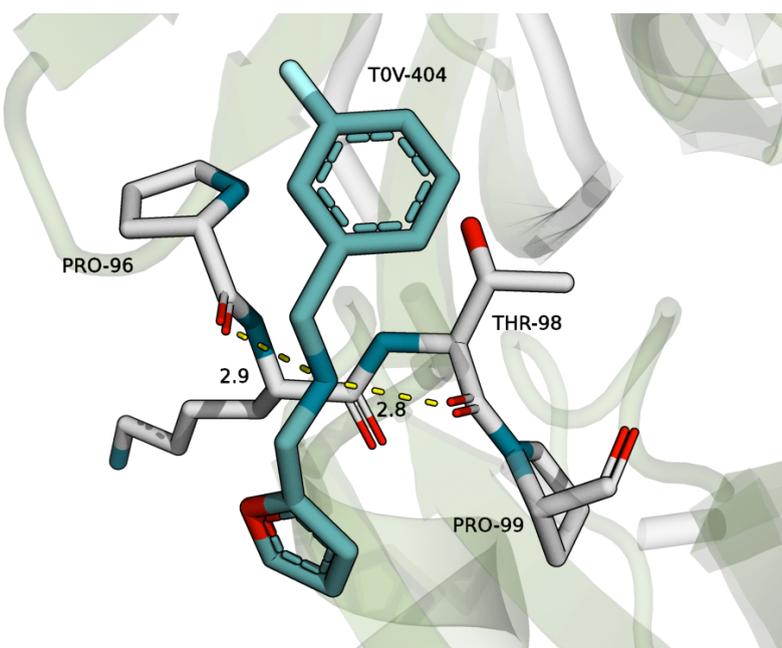
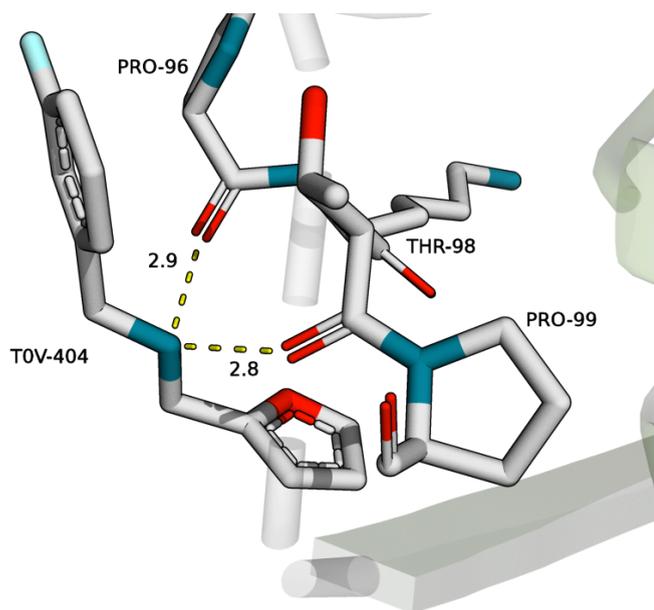


Рис. 1. Отрендеренное изображение участка протеазы SARS-CoV-2 с лигандом ToV

Рис. 2. Отрендеренное изображение участка протеазы SARS-CoV-2 с лигандом ToV (бирюзовый)

Файл [сессии PyMol](#) находится по адресу:

<https://kodomo.fbb.msu.ru/~vasidze/term7/pr1.pse>

Задание 2.

PDB IDs: 1OKX и 5AVD.

При рассмотрении двух структур я заметила, что в 1OKX отсутствует вода, что может означать, что разрешение данной структуры не позволяет точно и корректно различать атомы. Если посмотреть на одинаковый участок в обеих структурах (я взяла 16-26 остаток), то заметно, что в 1OKX электронная плотность как бы обволакивает остатки, не имея четкой формы, тогда как при рассмотрении 5AVD можно увидеть сферы

электронной плотности на атомах, что позволяет легче интерпретировать результаты PCA. Из этого я делаю вывод о том, что 5AVD имеет гораздо более высокое разрешение. Это согласуется с данными с сайта PDB – структура 1OKX имеет разрешение 2.80 Å, в то время как 5AVD имеет разрешение 0.86 Å.

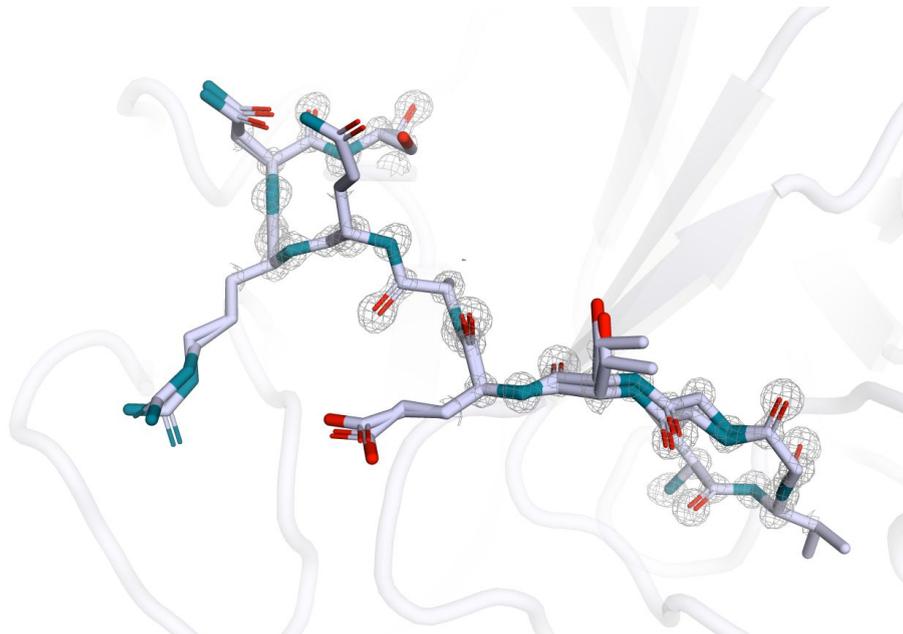


Рис. 3. Отрендеренное изображение участка фрагмента 5AVD. Carve = 1.5, уровень подрезки = 2.

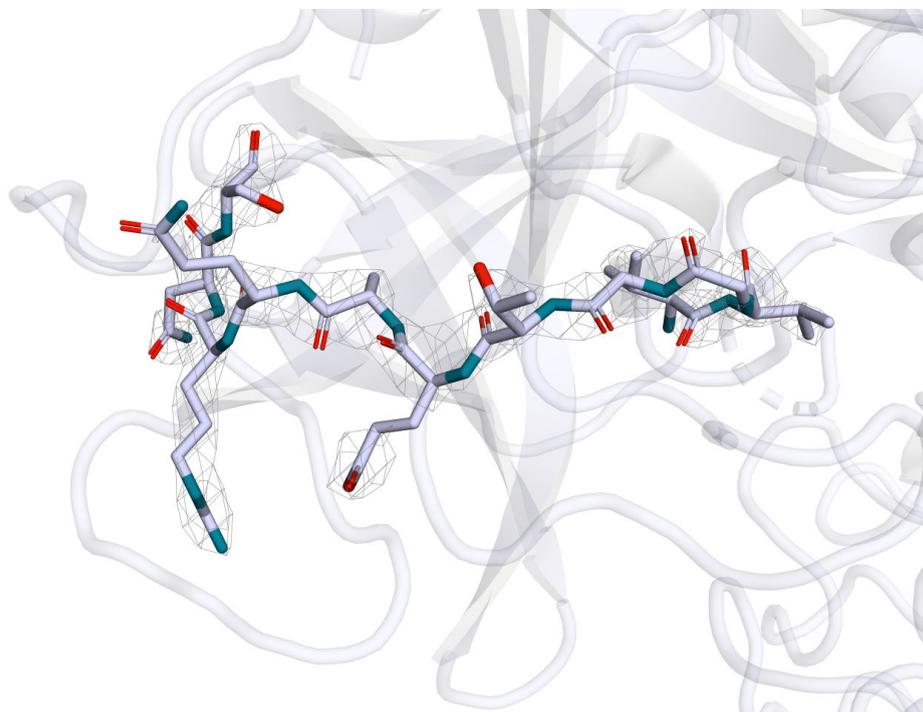


Рис. 4. Отрендеренное изображение участка фрагмента 1OKX. Carve = 1.5, уровень подрезки = 2.

Задание 3.

В этом задании я покрасила остов по b-фактору (самые подвижные элементы – розовые, наименее подвижные – фиолетовые). Я сделала это по причине того, что если какой-то участок обладает высокой подвижностью, то по логике у него должно быть более низкое качество электронной плотности. При увеличении уровня подрезки электронная плотность постепенно пропадает, но этот процесс начинается с более подвижных элементов, потому что при их PCA электронная плотность будет размазана по всему объему, в котором двигался фрагмент и следовательно сферическая электронная плотность будет не так четко прослеживаться.

Таким образом мое предположение оказалось верным – электронная плотность в первую очередь пропадает именно с наиболее подвижных участков, потому что при рентгеноструктурном анализе этих участков ЭП размазывается по всему объему, в котором двигался атом.

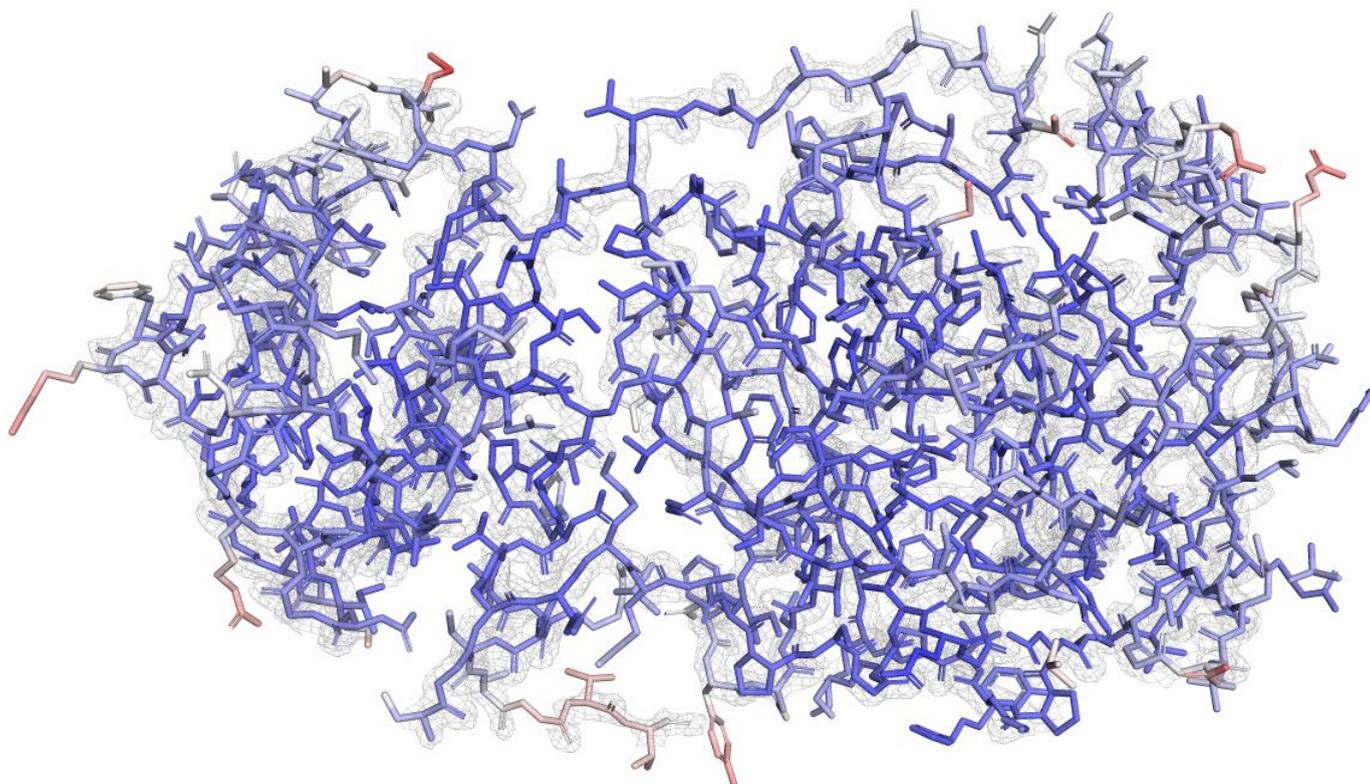


Рис. 5. Отрендеренное изображение остова протеазы SARS-CoV-2, окрашенного по b-фактору. Уровень подрезки = 1.

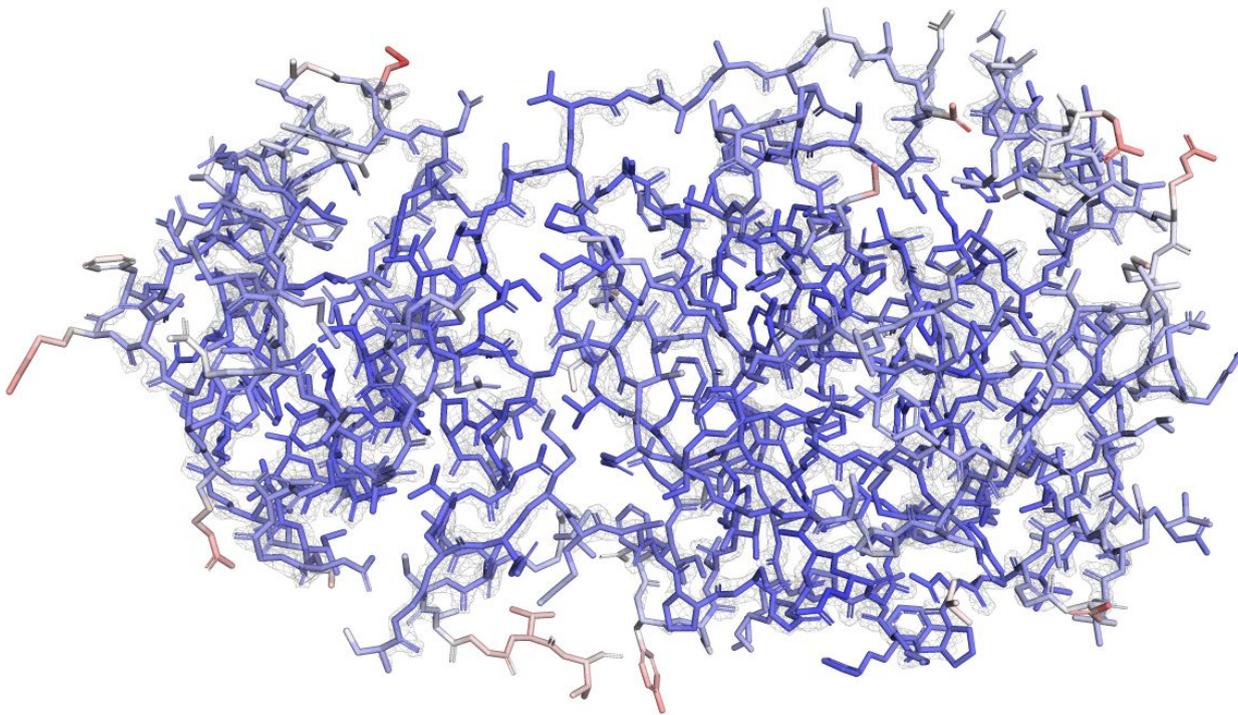


Рис. 6. Отрендеренное изображение остова протеазы SARS-CoV-2, окрашенного по b-фактору. Уровень подрезки = 2.

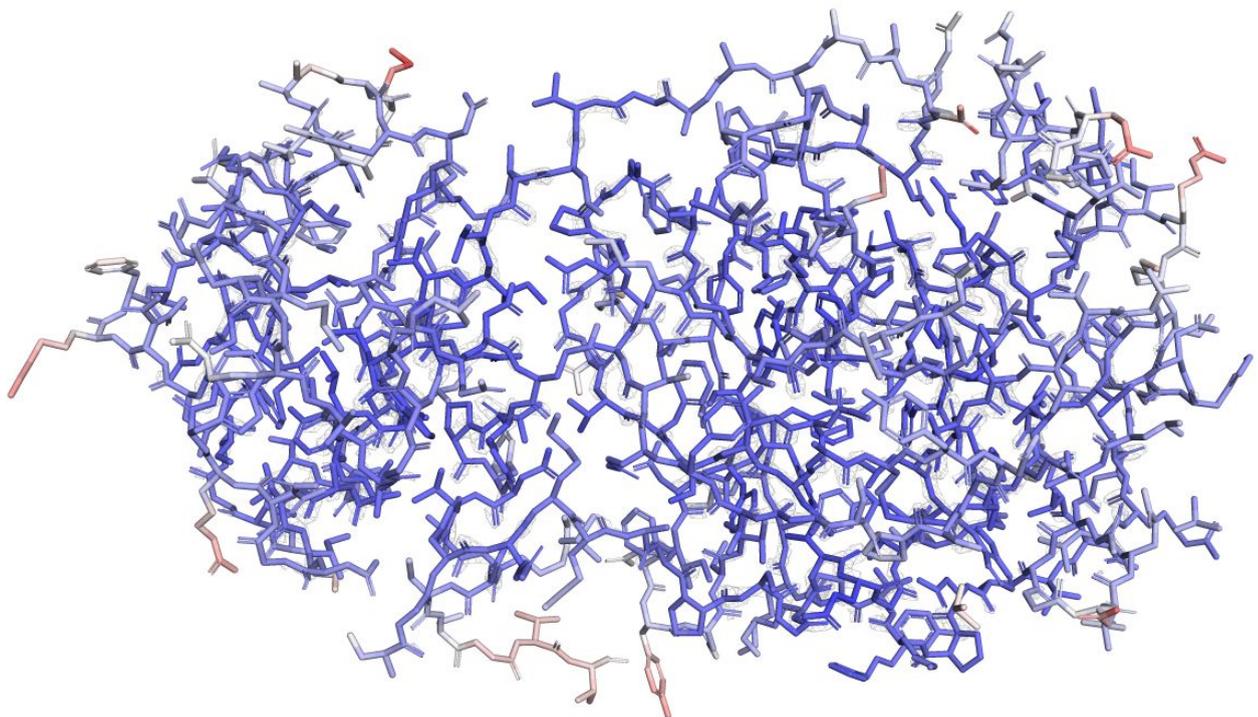


Рис. 7. Отрендеренное изображение остова протеазы SARS-CoV-2, окрашенного по b-фактору. Уровень подрезки = 3.

Задание 4.

В данном задании я рассматривала электронную плотность на разных уровнях подрезки для лиганда ToV. На первом уровне подрезки электронная плотность наблюдается достаточно хорошо, но уже на этом уровне на некоторых атомах она отсутствует (возможно это связано с подвижностью атомов). При повышении значения уровня подрезки электронная плотность покрывает все меньше остатков лиганда и на уровне подрезки равном 3 совсем пропадает. Поэтому я привожу картинки с уровнями подрезки = 1, 1.5 и 2. Наибольшее покрытие наблюдается на атомах с большим количеством электронов (кислород). Тем не менее при переходе к уровню подрезки = 2, электронная плотность видна только на кислороде.

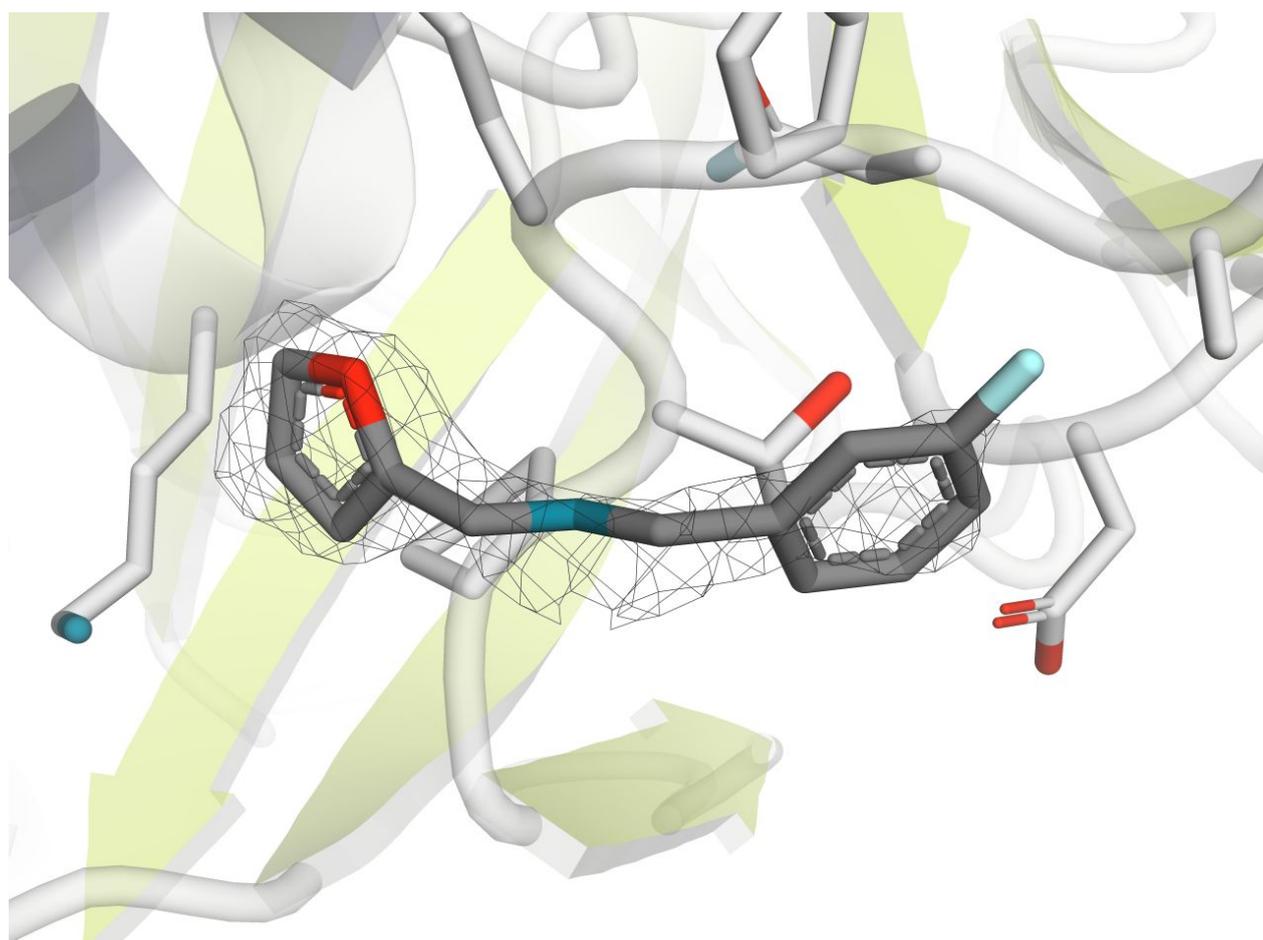


Рис. 7. Отрендеренное изображение лиганда ToV. Уровень подрезки = 1, carve = 2.

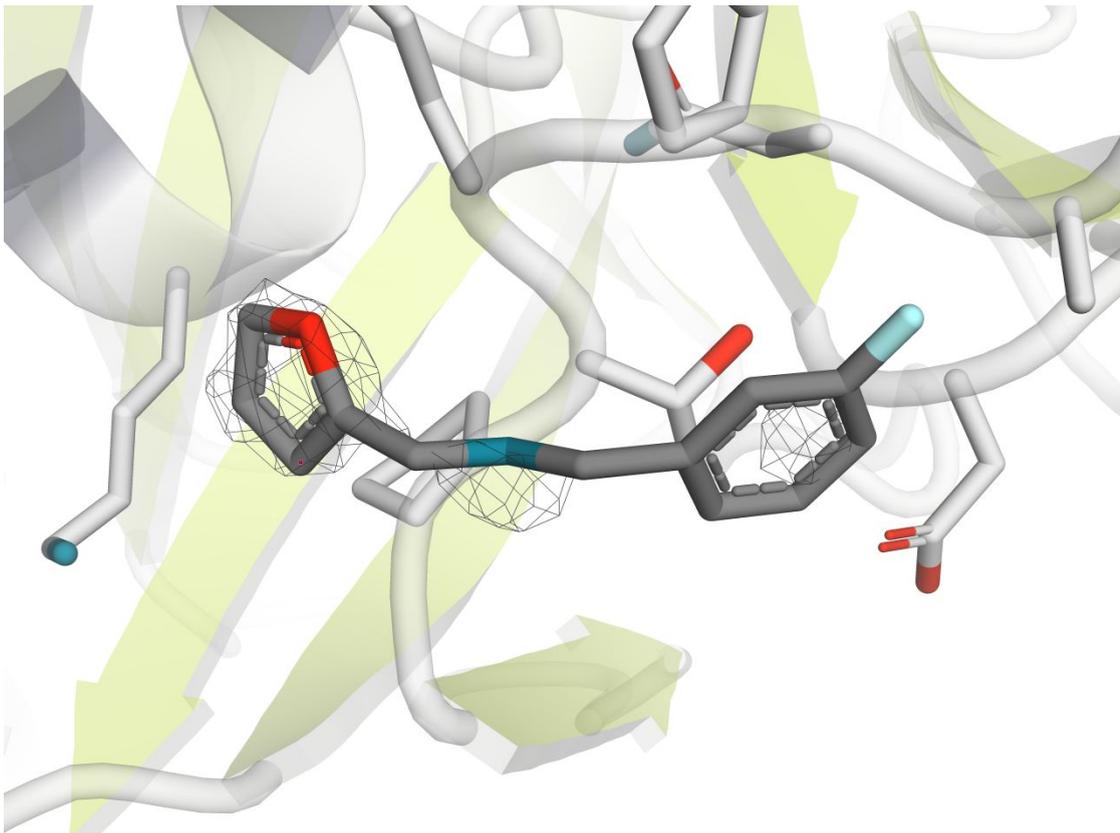


Рис. 7. Отрендеренное изображение лиганда ToV. Уровень подрезки = 1.5, carve = 2.

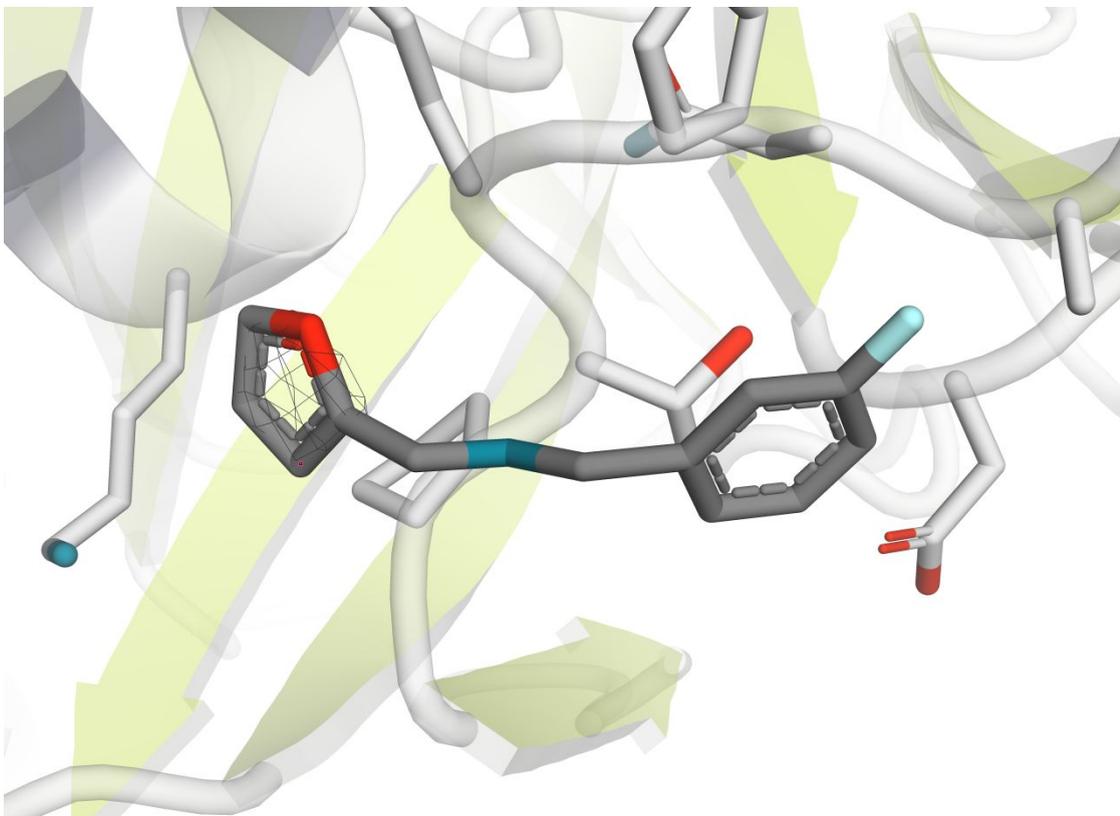


Рис. 7. Отрендеренное изображение лиганда ToV. Уровень подрезки = 2, carve = 2