

Поверхности, карманы, рКа.

Задание 1. SASA, MSA

Для выполнения практикума нам были даны две структуры с PDB ID (6jn7 и 6jn8), соответствующие открытой и закрытой конформации белка.

Две структуры были наложены друг на друга и при первичном рассмотрении выглядят очень похожими (рисунок 1).

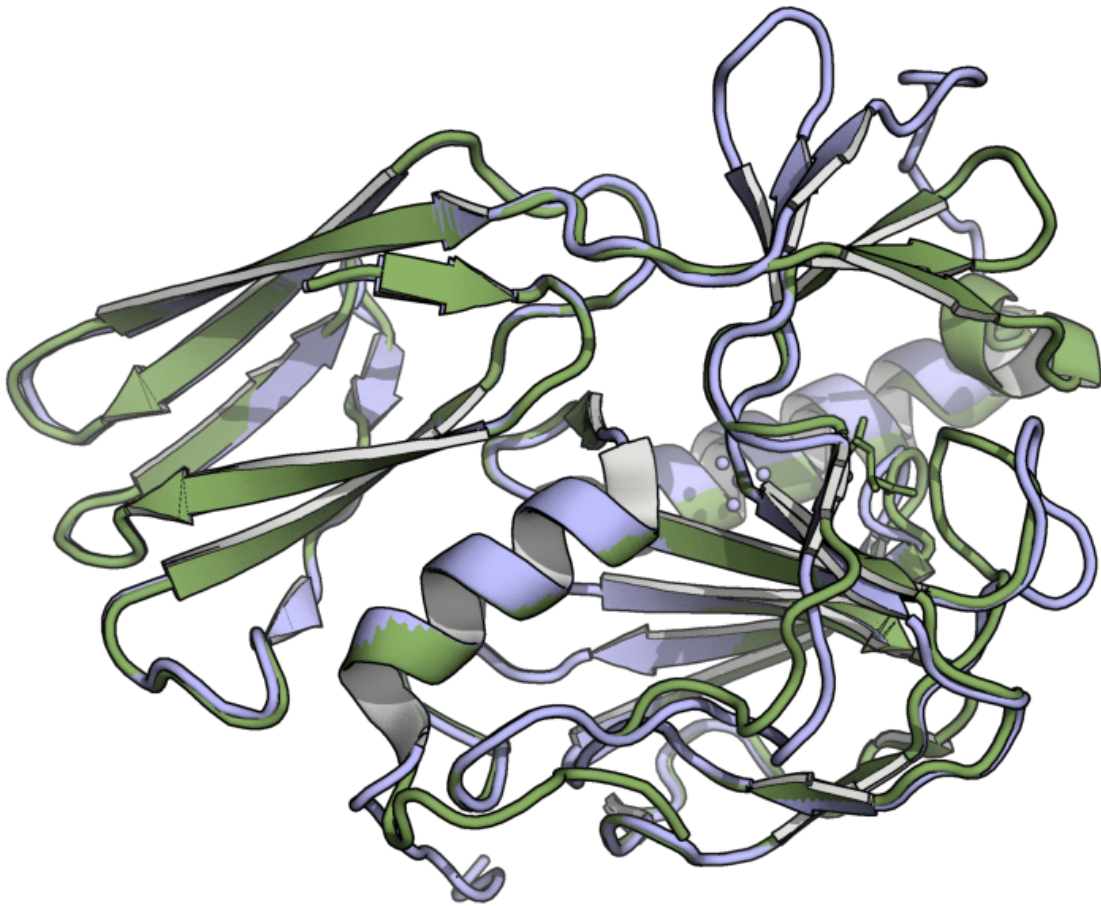


Рис. 1. Наложение структур 6jn8 (открытая конформация, зеленая окраска) и 6jn7 (закрытая конформация, голубая окраска).

Найденные мной различия в двух структурах:

- В открытой конформации наблюдается небольшая альфа-спираль отсутствующая в закрытой конформации (рисунок 3)
- В одном месте бета-тяжи сильно отходят друг от друга (рисунок 4)
- В одном месте альфа-спирали наложились не полностью и слегка расходятся (рисунок 5)

- В закрытой конформации в одном месте альфа-спираль продолжается дольше, чем в открытой (рисунок 6)

Каких либо более принципиальных различий в двух структурах мне обнаружить не удалось.

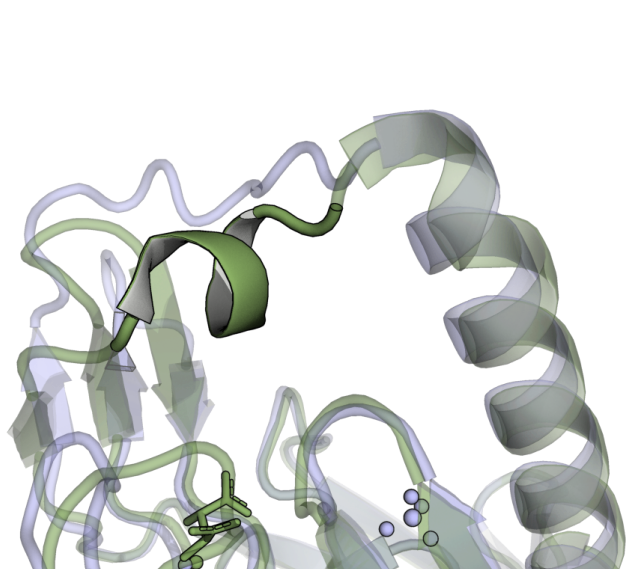


Рис. 3. Наложение структур открытой (зеленая) и закрытой конформации (голубая)

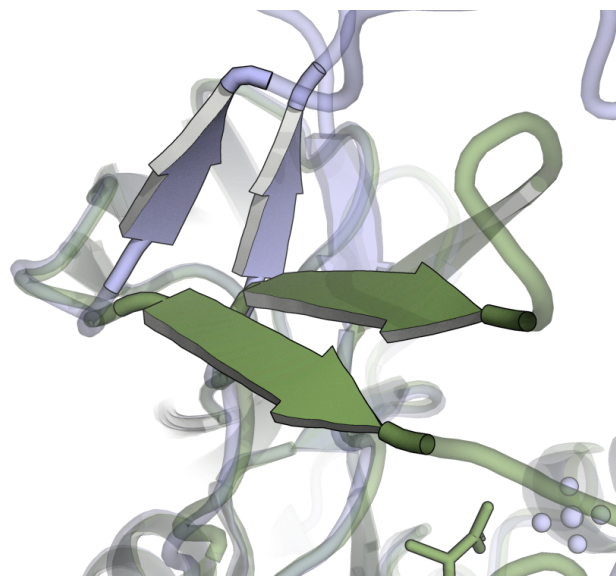


Рис. 4. Наложение структур открытой (зеленая) и закрытой конформации (голубая)

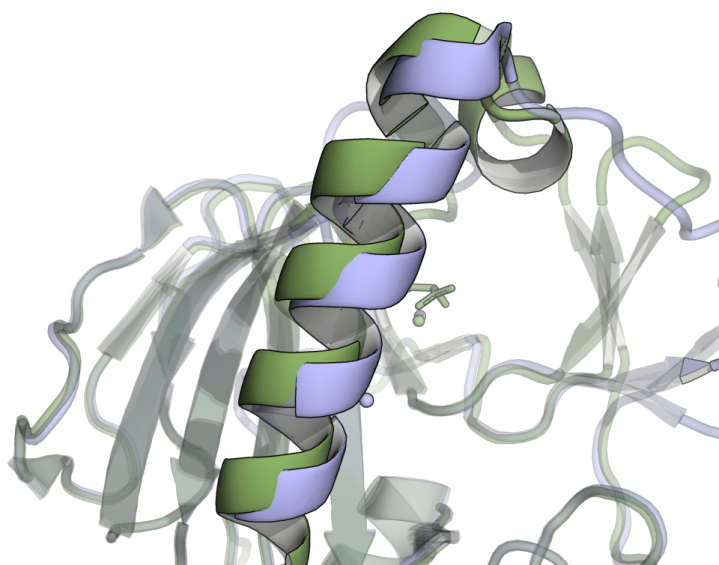


Рис. 5. Наложение структур открытой (зеленая) и закрытой конформации (голубая)

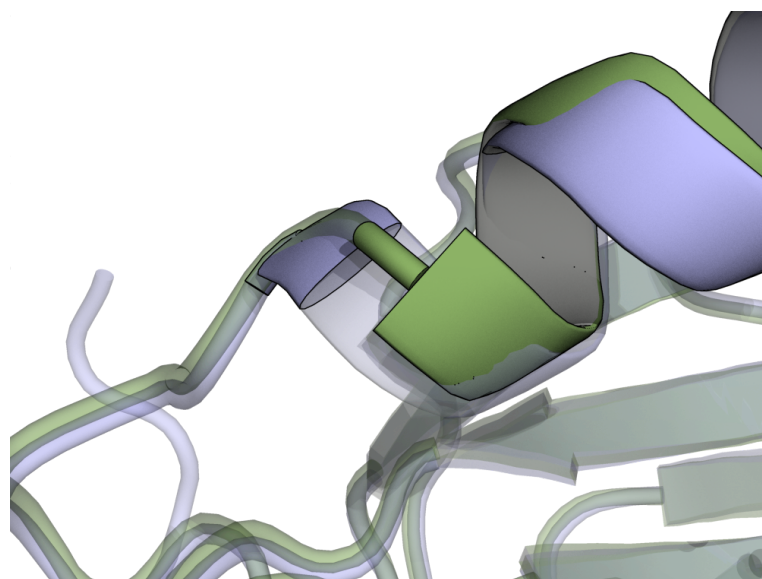


Рис. 6. Наложение структур открытой (зеленая) и закрытой конформации (голубая)

Следующим шагом для каждой формы были найдены площади молекулярной поверхности (MS) и площади поверхности, доступной растворителю (SAS).

	MS, A ²	SAS, A ²
6jn7 (close)	27303.822	13400.033
6jn8 (open)	27142.252	14402.860

Площадь молекулярной поверхности у двух конформаций вышла почти одинаковая, что можно было ожидать при визуальном сравнении этих двух структур.

Площадь поверхности, доступная растворителю в открытой конформации на 1002.827 больше, чем в закрытой.

Задание 2. Карманы, объем.

Визуально был выбран основной карман связывания (рисунки 7 и 8).

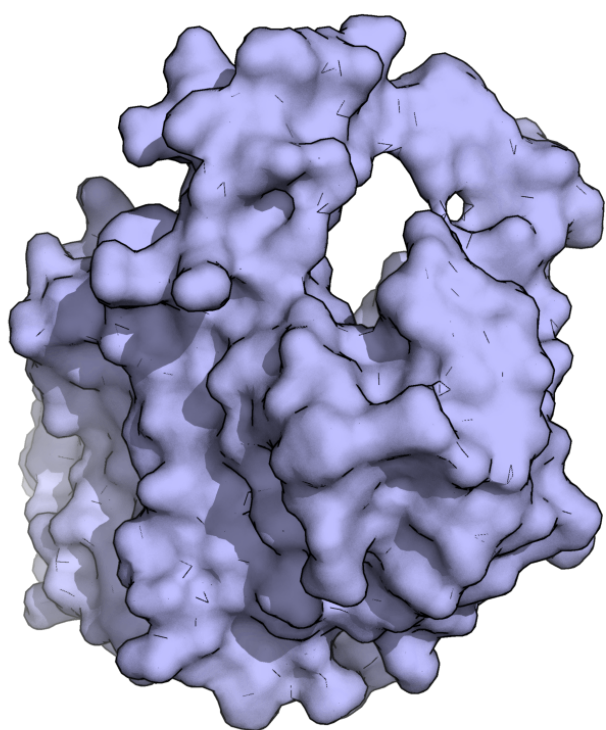


Рис. 7. Открытая конформация (6jn8) для определения кармана (сверху справа).

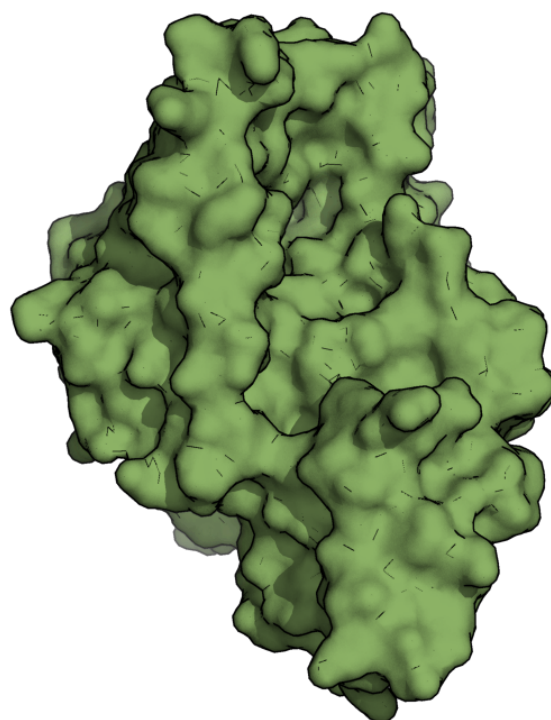


Рис. 8. Закрытая конформация (6jn7) для определения кармана (сверху справа).

Следующим шагом с помощью веб-сервера frocket были предсказаны положения и параметры карманов.

Для структуры 6jn8 (открытая конформация) было найдено 25 потенциальных карманов. На искомый карман был больше всего похож первый (volume: 332.653).

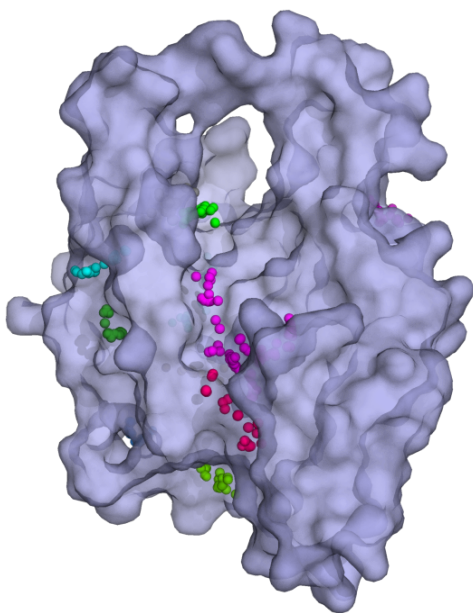


Рис. 9. Потенциальные карманы в структуре 6jn8

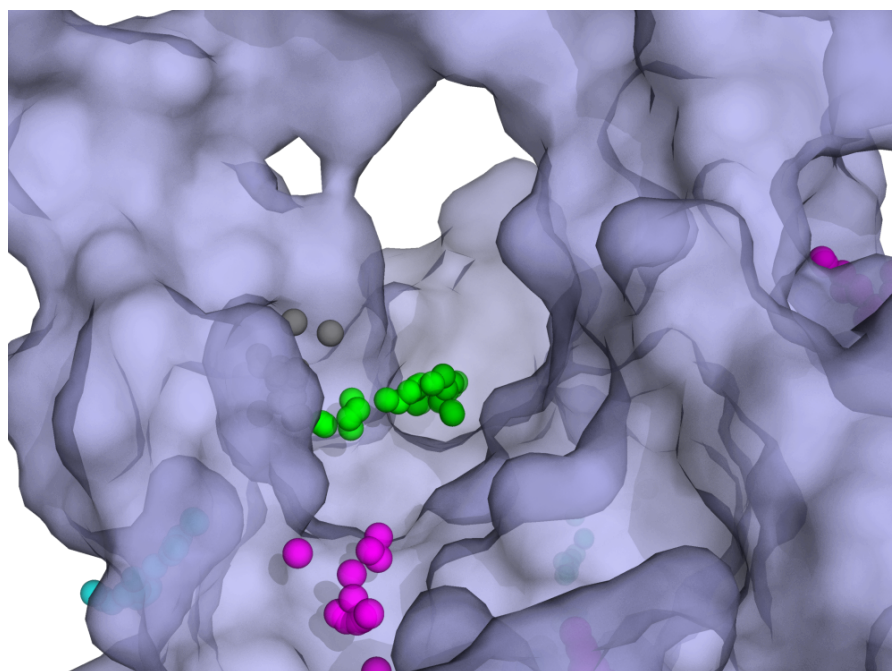


Рис. 10. Нужный нам карман в структуре 6jn8

Для закрытой конформации (6jn7) было найдено 12 потенциальных карманов. Искомым карманом выглядит карман номер 3 (volume - 270.125).

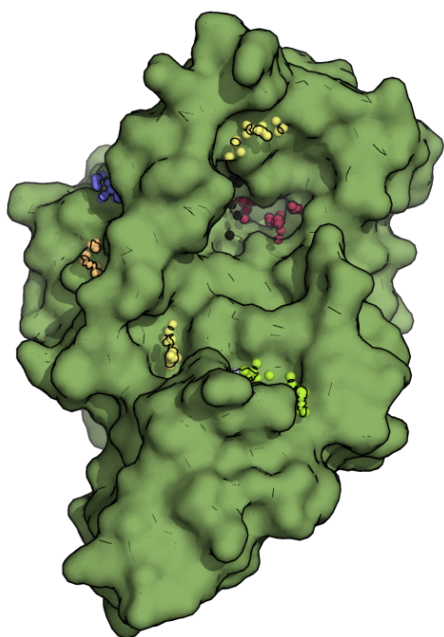


Рис. 11. Потенциальные карманы в структуре 6jn7

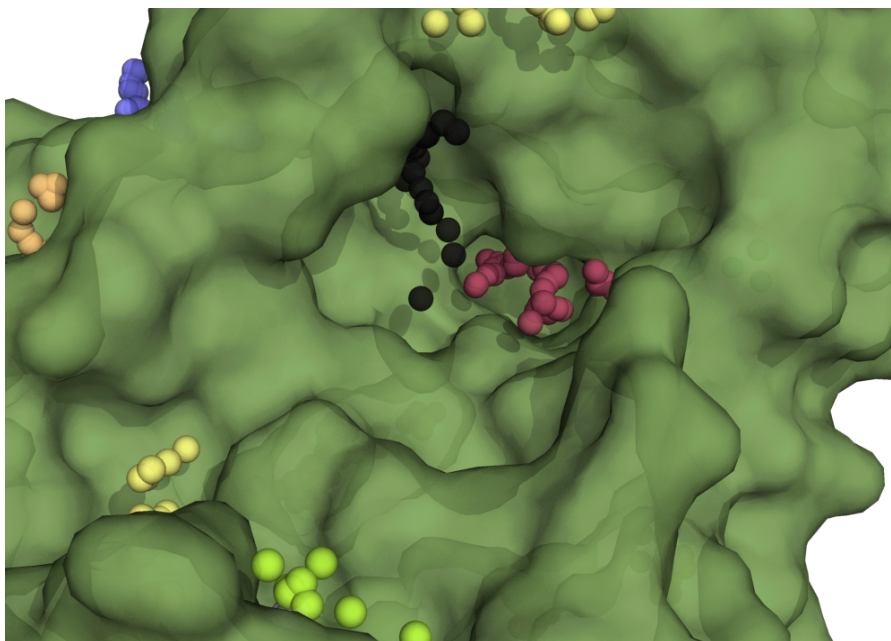


Рис. 12. Нужный нам карман в структуре 6jn7

Задание 3. Экспонированность.

В этом задании рассматривалась экспонированность каждого остатка в открытой и закрытой конформации белка.

Больше всего изменилась экспонированность при переходе к закрытой конформации белка у ASN-143 (значение ACC было 143, а стало 22).

В случае закрытой конформации радикал больше направлен в сторону центра белка, что резонно.

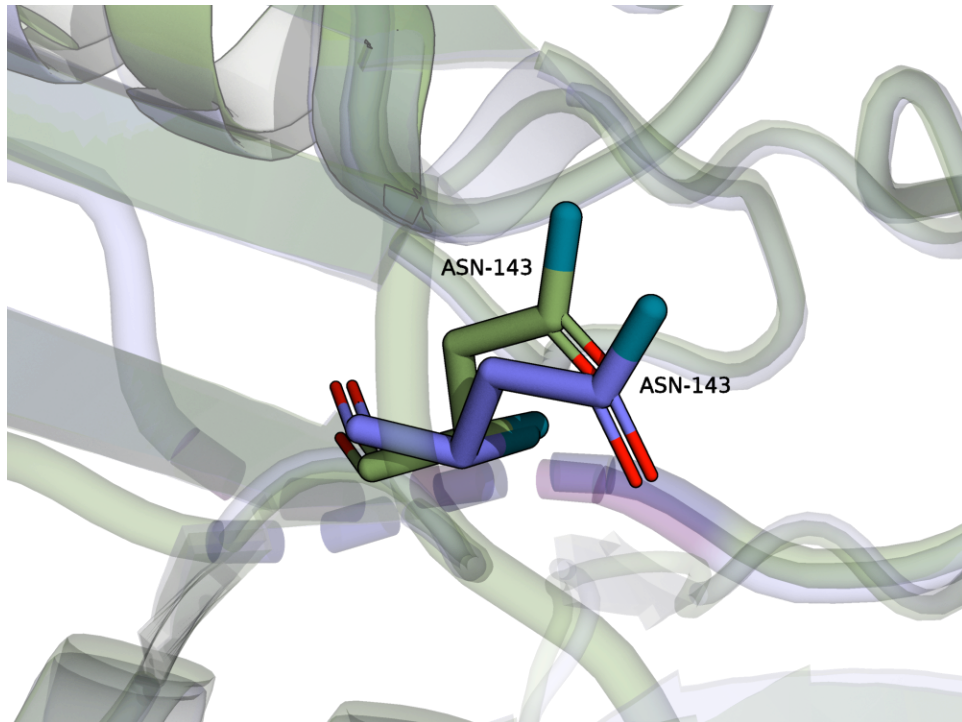


Рис. ASN-143 в закрытой (зеленая окраска) и открытой (фиолетовая окраска) конформациях белка.