

Разметка вторичной структуры

Задание 1. Знакомство с укладками

В этом задании нам были даны 10 записей PDB, демонстрирующие не более 40% попарного сходства. Они были выровнены по одной опорной (4zoqM00) (рисунок 1). Структуры были наложены друг на друга с помощью команд:

```
super 1ga6A00, 4zoqM00  
super 1gt9100, 4zoqM00  
super 2iy9A00, 4zoqM00  
super 2qtwB01, 4zoqM00  
super 3afgA02, 4zoqM00  
super 3edyA02, 4zoqM00  
super 3f7oA00, 4zoqM00  
super 3lxuX01, 4zoqM00  
super 4aktB00, 4zoqM00
```

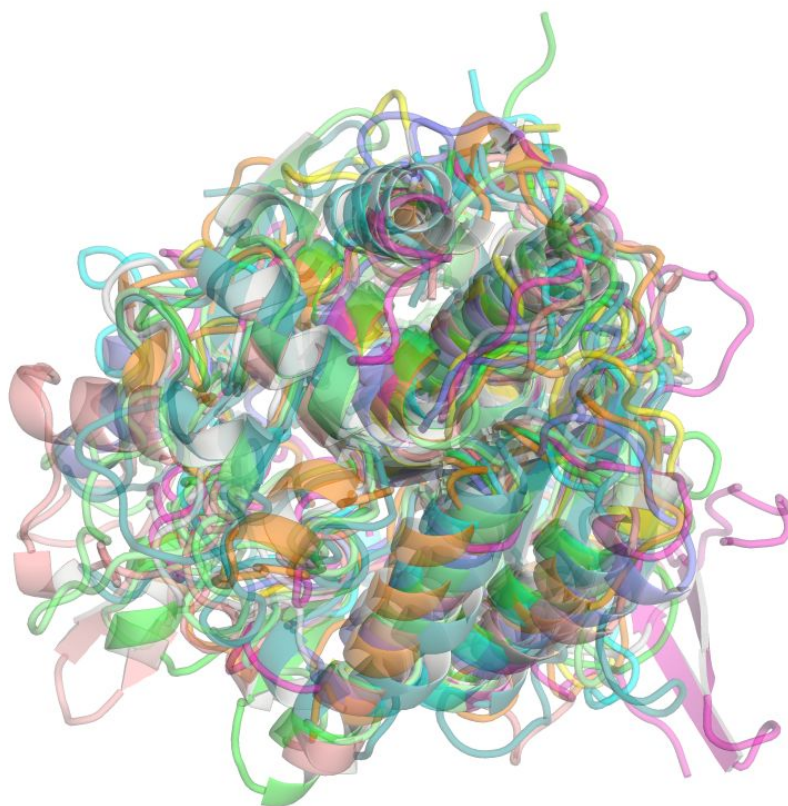


Рис.1.

Укладка структур довольно похожа. Тем не менее можно заметить, что у нескольких структур бета-листы выходят за пределы общей структуры (3lxuX01 - фуксия), тогда как в случае 4aktB00 (голубой), 3edyA02 (salmon) сильно выступают альфа-спирали. Также в некоторых случаях присутствуют дополнительные альфа-спирали и более длинные

бета-листы. У опорной структуры наблюдаются участки альфа спиралей, выдающиеся за пределы общей структуры. Дополнительно мне удалось заметить, что, хотя альфа-спирали внутри молекулы наложались довольно хорошо, некоторые из них слегка смещены.

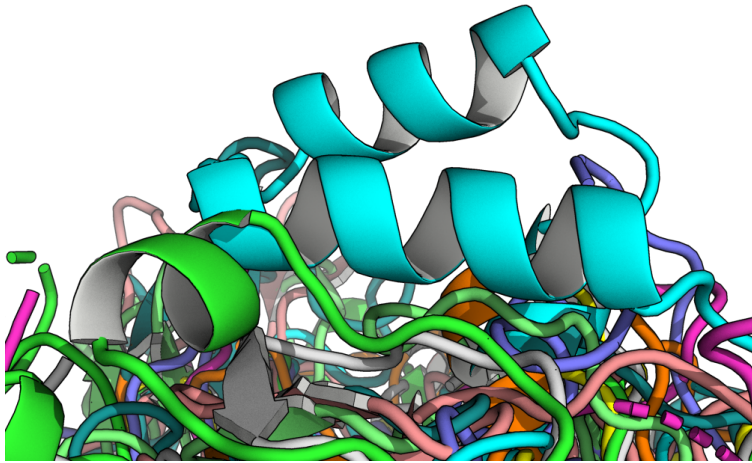


Рис. 2. Дополнительные альфа-спирали 4aktBoo

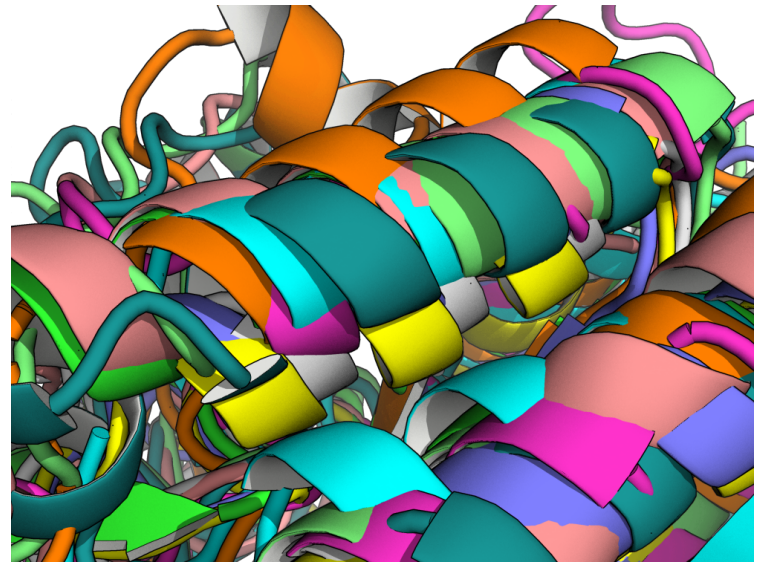


Рис. 3. Смещение альфа спиралей при наложении (оранжевая структура – 2iy9Aoo)

Задание 2. Работа с разметкой вторичной структуры в ручном режиме

Целью данного задания было сравнить участки вторичной структуры двух белков. для рассмотрения я выбрала бета-листы белков 4zoqMo0 (синяя окраска) и 3lxiXo1 (фуксия) (рисунок 4).

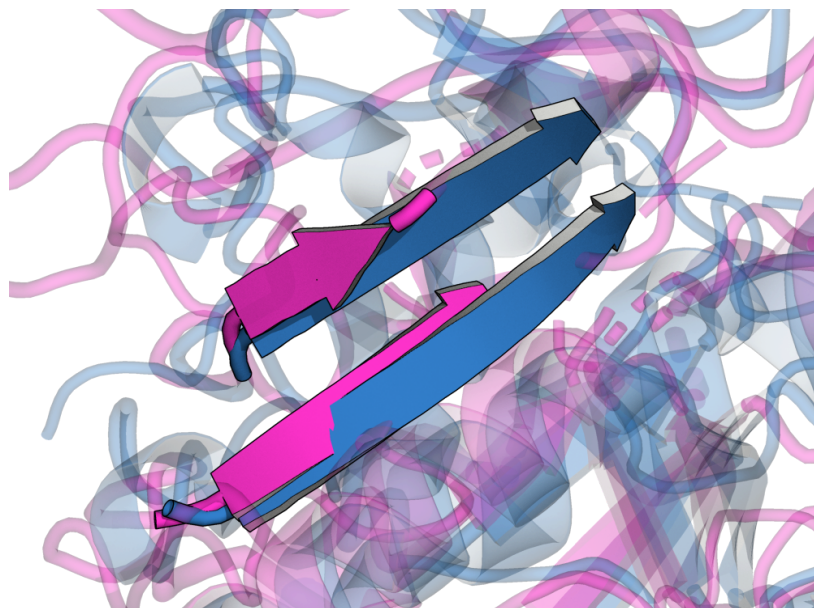


Рис. 4. Бета-листы структур 4zoqMo0 (синяя окраска) и 3lxiXo1 (фуксия)

В случае 3lxiX01 бета-листы гораздо короче, чем в случае 4zoqM00. Также в случае В 3lxiX01 аминокислоты расположены более хаотично и наблюдаются неправильные углы, из-за чего некоторые связи не образуются.

Тем не менее в общем можно сказать, что PyMol справился с задачей разметки вторичной структуры.

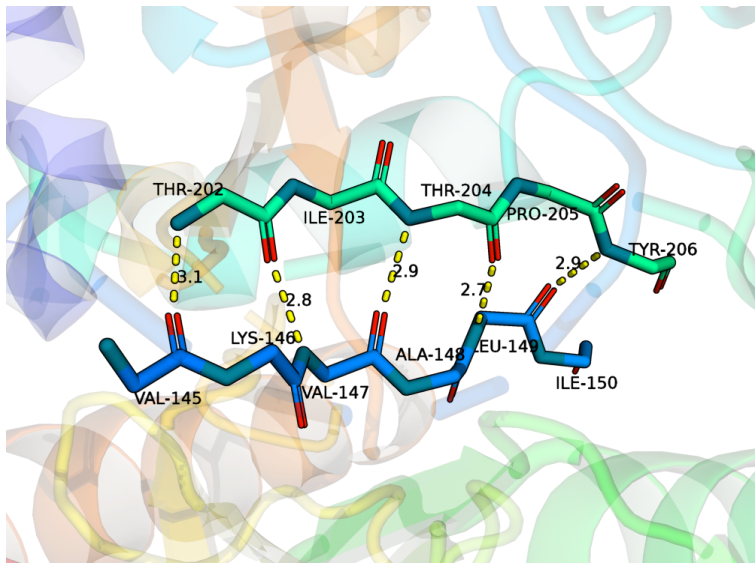


Рис 5. Вторичная структура 4zoqM00.

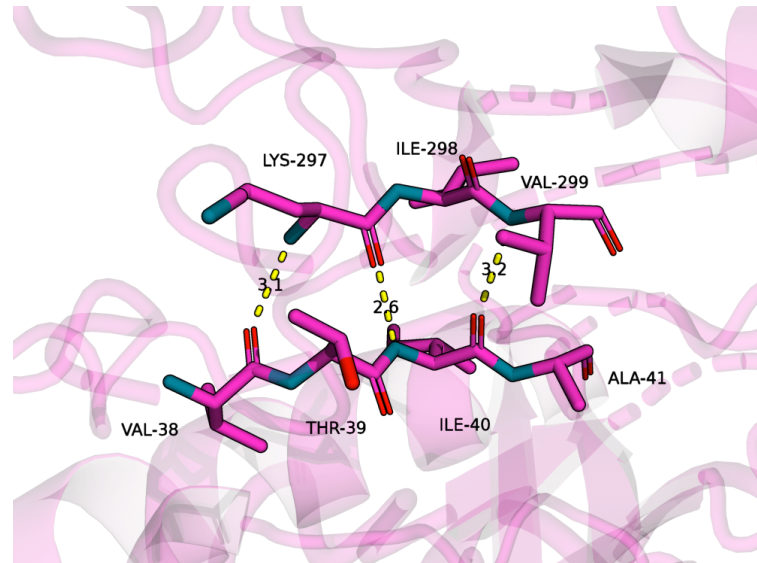


Рис 6. Вторичная структура 3lxiX01.

Задание 3. Работа с разметкой вторичной структуры в автоматическом режиме

Целью этого задания было рассчитать склонность аминокислотных остатков образовывать тот или иной тип вторичной структуры.

Для всех данных последовательностей в формате dssp была получена разметка вторичной структуры.

После обработки данных по формуле $P_{ik} = (n_{ik}/n_i) / (N_k/N)$ были посчитаны и записаны в таблицу склонности:

Остаток	Петля ('C')	Бета-лист ('E')	Альфа-спираль ('H')
A	0.733	0.91	1.59
G	1.40	0.60	0.49
K	0.98	0.79	1.19
N	1.34	0.54	0.65
E	1.00	0.79	1.16

F	0.84	1.44	1.00
I	0.52	1.97	1.28
Y	1.10	1.25	0.63
S	1.12	0.84	0.88
V	0.75	2.03	0.77
Q	0.86	0.78	1.42
W	0.99	1.17	0.89
C	1.11	1.26	0.61
R	0.98	0.68	1.26
T	0.91	1.37	0.91
H	0.99	0.64	1.27
P	1.44	0.52	0.46
D	1.33	0.47	0.715
L	0.712	1.13	1.48
M	0.28	0.66	2.65

Таблица 1. Склонность аминокислотных остатков образовывать тот или иной тип вторичной структуры.

По полученным данным можно сказать, что:

- В альфа-спиралях чаще всего встречаются аланин и метионин.
- В бета-листах чаще всего встречаются изолейцин и валин.
- В петлях чаще всего находятся глицин и пролин.
- Заметно чаще образует альфа-спирали аланин.
- Заметно чаще образует бета-тяжи валин.
- Заметно чаще образует петли глицин.