

Практикум 2

Задание 1

В данном задании нам необходимо было посмотреть на две структуры одного и того же белка, однако с разным качеством. В нашем случае были выбраны структуры под идентификаторами 1CJQ и 6ETK.

При просмотре сразу становятся заметными некоторые различия во вторичной структуре белка - так, например, в структуре 1CJQ есть болтающаяся альфа-спираль, не связанная с остальным белком, в то время как в 6ETK эта альфа-спираль соединена с общей структурой. Также в 1CJQ элементы вторичной структуры в среднем короче, чем у 6ETK.

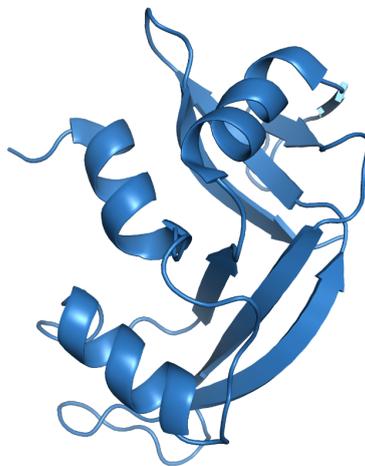


Рис.1. Структура 6ETK.

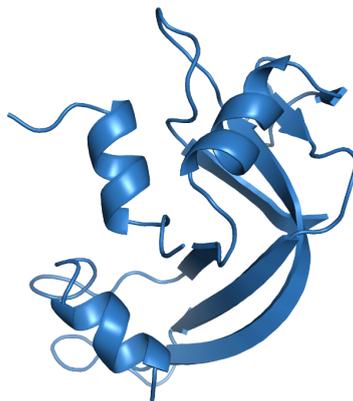


Рис.2. Структура 1CJQ.

Посмотрим на электронную плотность выбранных структур в месте терминальной альфа-спирали (там, где у 1CJQ наблюдается разрыв последовательности). Для этого выберем участок с 13 по 25 аминокислоты.

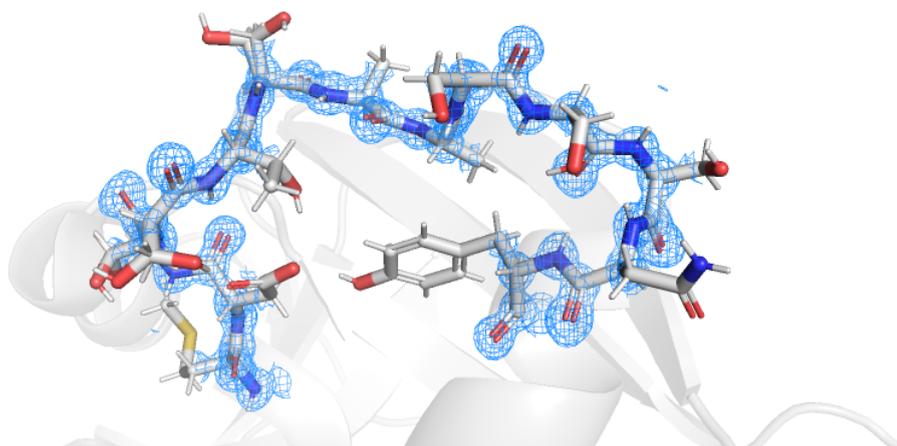


Рис.3. Электронная плотность 13-25 аминокислот в структуре 6ETK. Уровень подрезки - 1.5

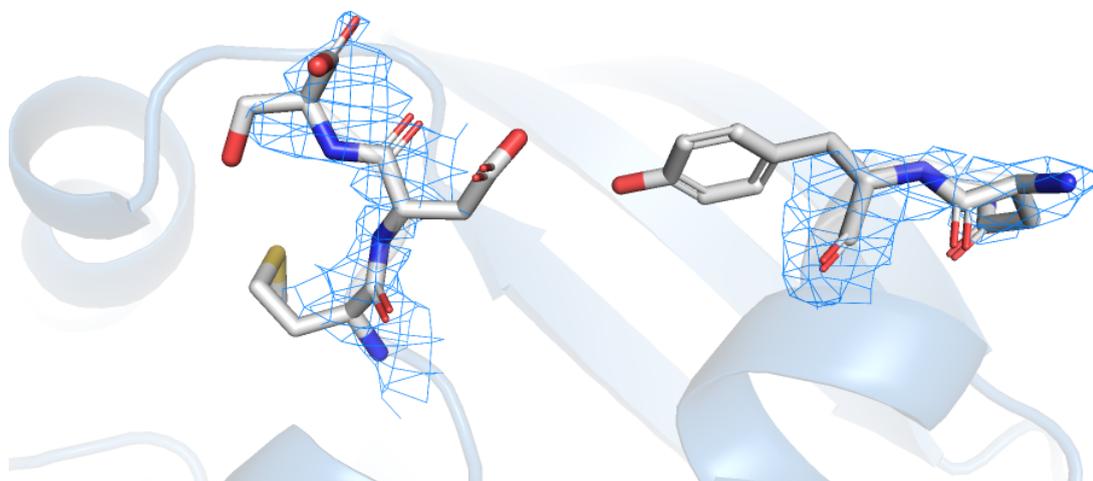


Рис.4. Электронная плотность 13-25 аминокислот в структуре 2ERO. Уровень подрезки - 1.5

В структуре 6ETK очень хорошо видны “шарики”, соответствующие отдельным атомам - вероятно, это структура с хорошим разрешением. Тем временем в структуре 2ERO указано как-то мало аминокислот - их на Рисунке 4 точно не 12. Это всё потому что части аминокислот просто нет в структуре - там просто нет электронной плотности, куда их можно было бы вставить. Да и в принципе само распределение электронной плотности в 2ERO намного более рваное и нечёткое.

Проверим наши догадки по разрешению структур в базе данных PDB.

PDB ID	Разрешение
6ETK	0.85 Å
2ERO	3.00 Å

Как видим, наши предположения подтвердились - разрешение у структуры 2ERO очень низкое, от этого и пропущенные аминокислоты.

Задание 2.

Посмотрим на электронную плотность структуры 3UQV на разных уровнях подрезки.

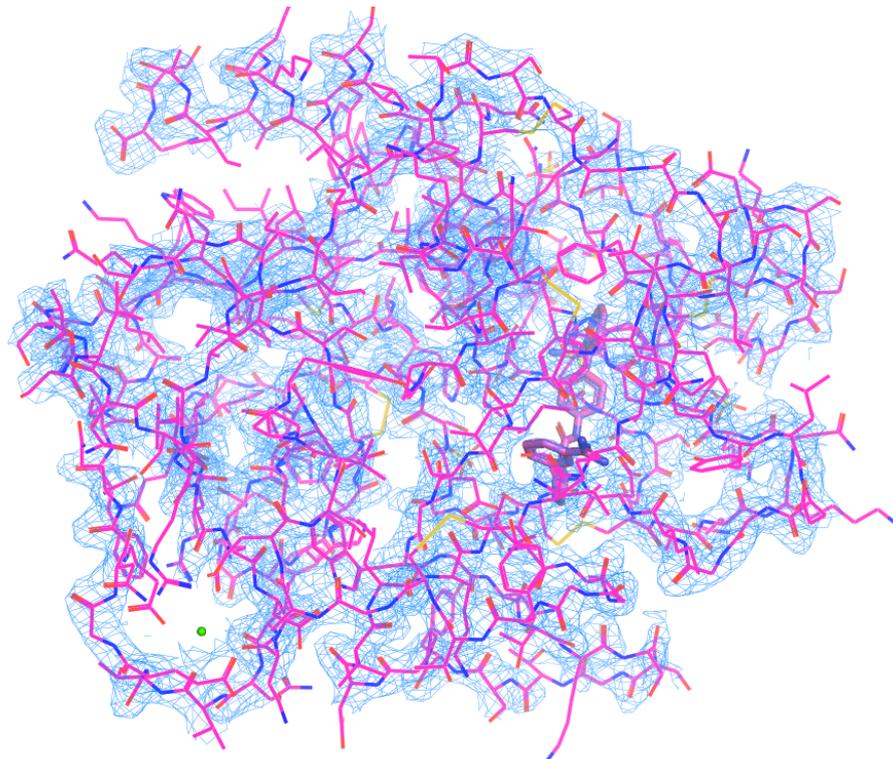


Рис.5. Структура 3UQV, уровень подрезки - 1.

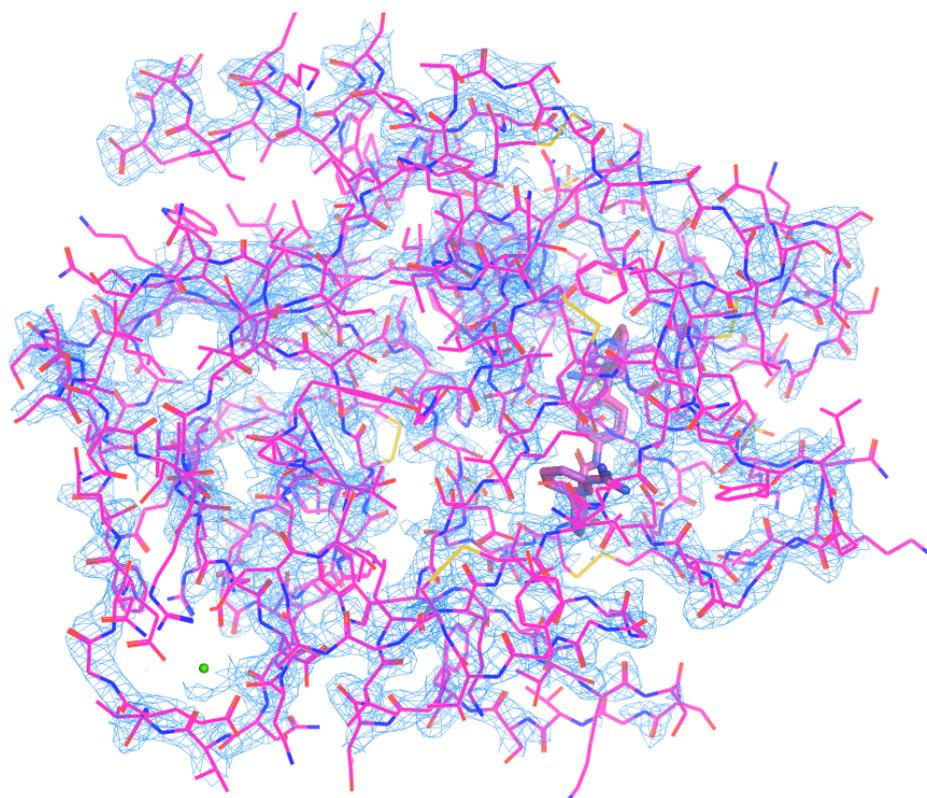


Рис.6. Структура 3UQV, уровень подрезки - 1.5.

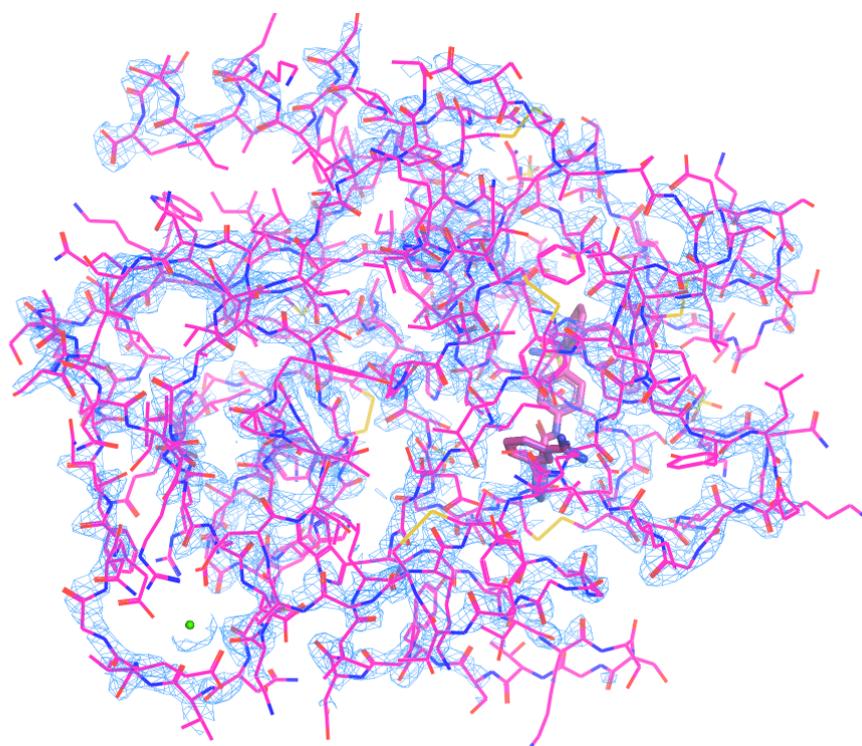


Рис.6. Структура 3UQV, уровень подрезки - 2.

Видно, что при увеличении подрезки первой пропадает электронная плотность на концах белка и на участках, расположенных снаружи белковой молекулы. Вероятно, это происходит из-за их гибкости, т.к. эти участки не являются

критическими важными для выполнения белком своей функции и поэтому могут более-менее свободно “болтаться”, и из-за подвижности своей структуры в этих места электронная плотность ниже

Задание 3.

Лигандом в структуре 3UQV является молекула под названием, которое я никогда не скажу при своей маме:

3-(3-карбамимидоилфенил)-N-(2'-сульфамоилбифенил-4-ил)-1,2-оксазол-4-карбоксамид.

Для экономии времени будем пользоваться аббревиатурой ЗУН.

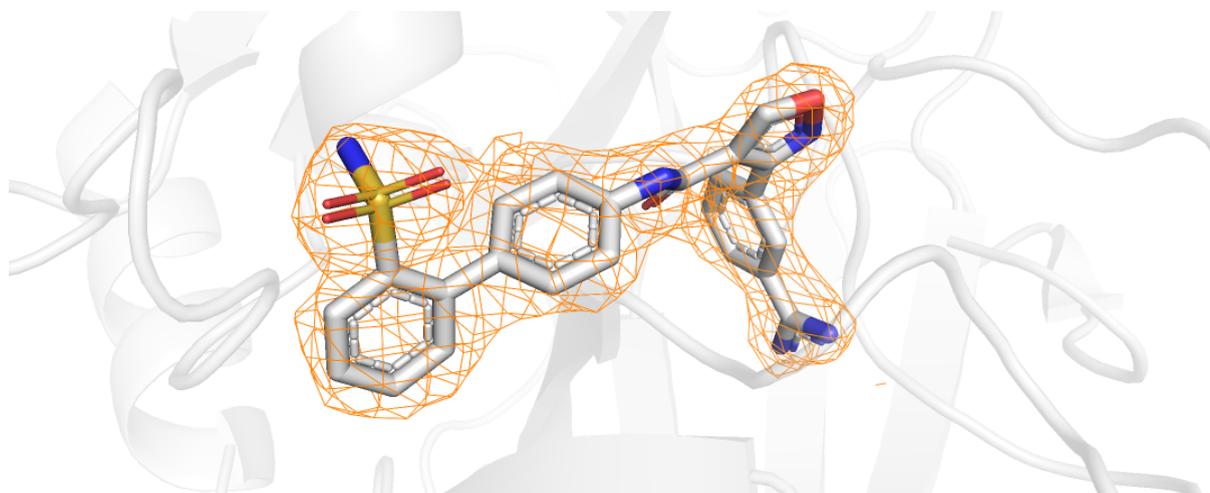


Рис.7. Электронная плотность лиганда ЗУН, уровень подрезки - 1.

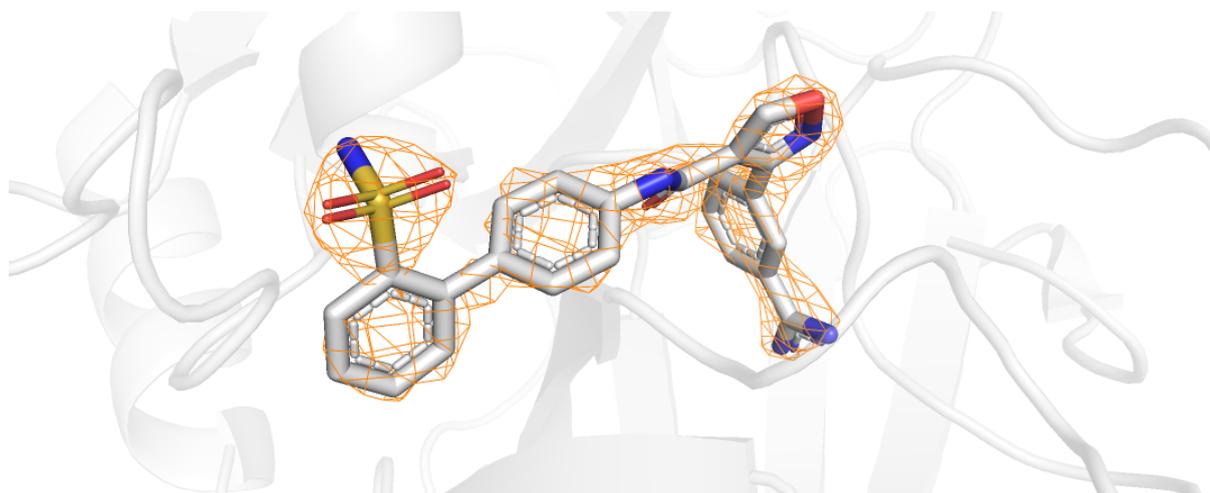


Рис.8. Электронная плотность лиганда ЗУН, уровень подрезки - 2.

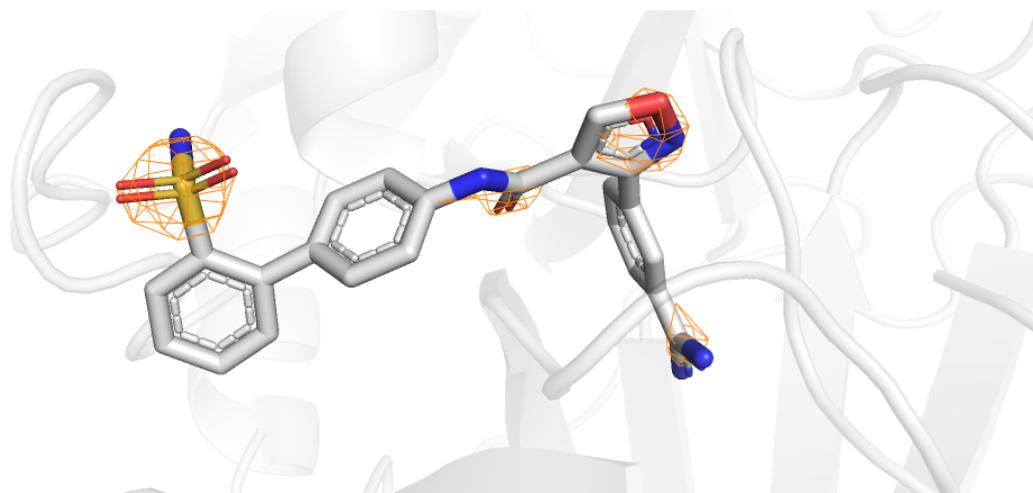


Рис.9. Электронная плотность лиганда 3УН, уровень подрезки - 3.

Как мы видим, при увеличении уровня подрезки, электронная плотность пропадает неравномерно. При уровне подрезки, равном 3, она остаётся на атомах кислорода, азота и серы. Это, вероятнее всего, связано с их электроотрицательностью, большей, чем у атомов углерода, поэтому в этих атомах выше электронная плотность.

Сессии PyMol

Сессию PyMol можно скачать по [этой ссылке](#)