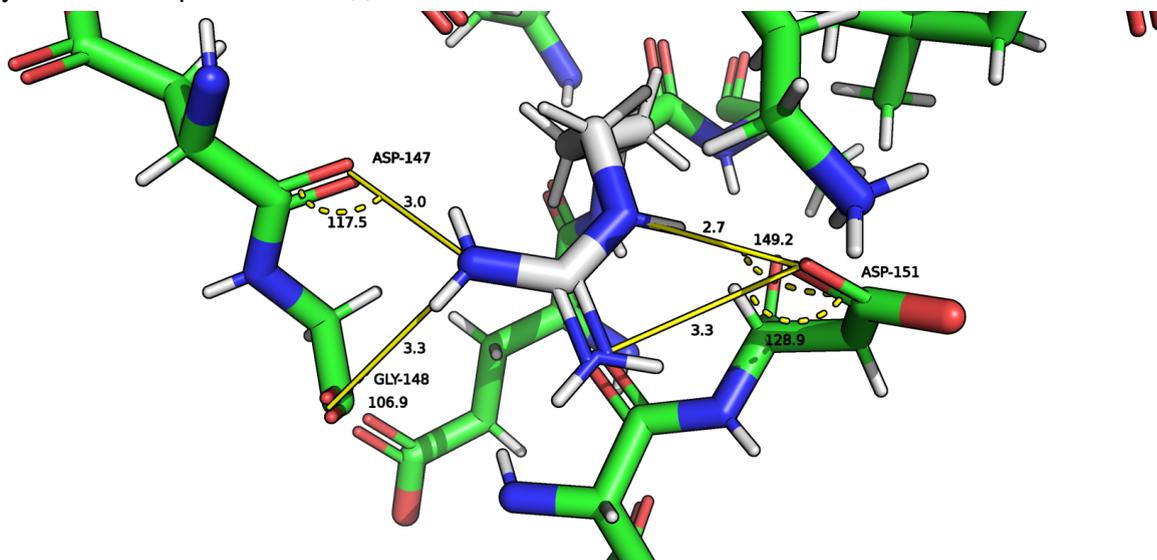
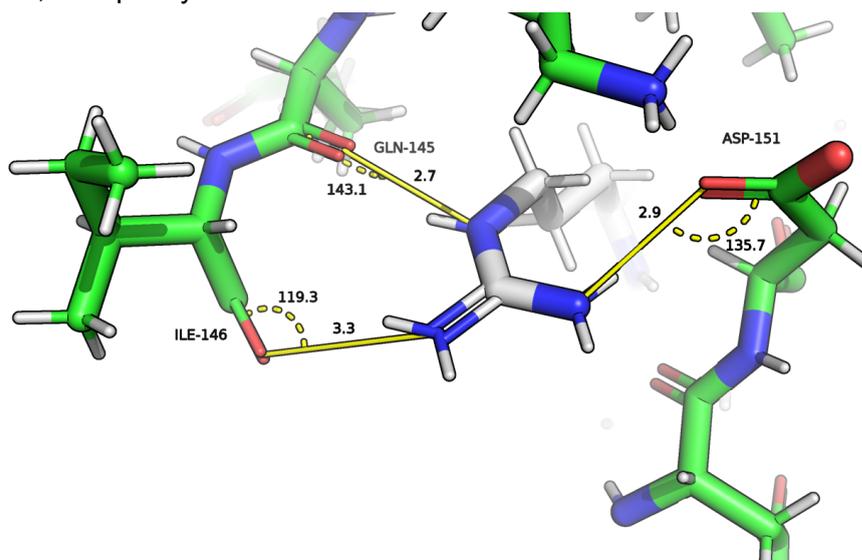


## Задание 1

В данном задании предлагалось исследовать альтернативные конформации остатка аргинина 154 в структуре белка класса гидролаз из трихомонады. Получены изображения альт-локов, для них найдены потенциальные взаимодействия, которые могут стабилизировать в каждом из них.



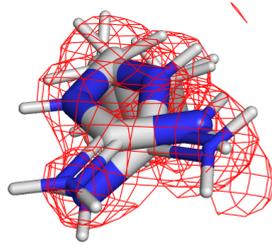
Альт-лок А, осцирансу = 0.47



Альт-лок В, осцирансу = 0.53

Обе конформации имеют схожий осцирансу, но странно, что у конформации с большим количеством потенциальных водородных связей это значение меньше.

Чтобы проверить данный парадокс я просмотрел углы взаимодействующих групп, длины этих связей и пришел к выводу, что два этих альт-лока по параметрам водородных связей практически идентичны, кроме того лишь факта, что в одном из них на одну связь больше. Допускать неверное восстановление координат атомов я бы не стал, так как они очень хорошо согласуются с электронной плотностью.

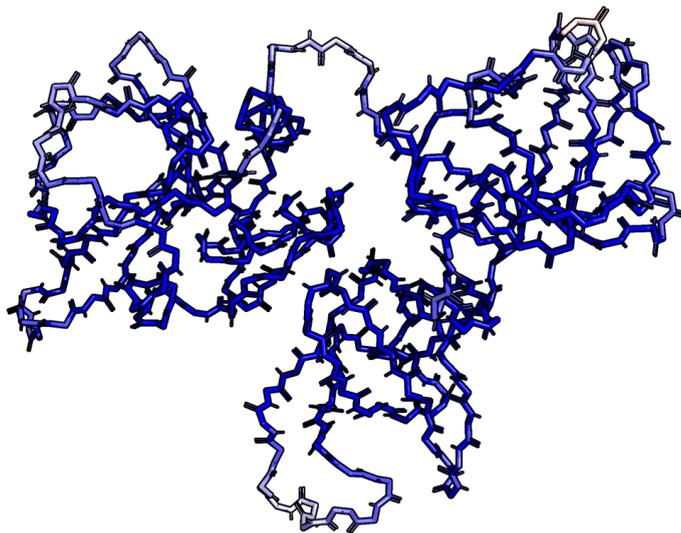


Таким образом, данное противоречие можно устранить двумя способами:

Первый - допустить, что стабильность альт-локов зависит не только от водородных связей, которые стабилизируют их непосредственно, но и от неучтенных дистантных взаимодействий. В таком случае мы доверяем алгоритму, вычисляющему осцирапсу строго по электронной плотности,

Второй - предположить, что осцирапсу как характеристика стабильности альт-локов не применима в данном конкретном случае, или что алгоритм который его подбирает только по электронной плотности плохо справляется. Возможно, если внести в него фактор потенциальных взаимодействий в дополнение к электронным плотностям, получились бы другие результаты.

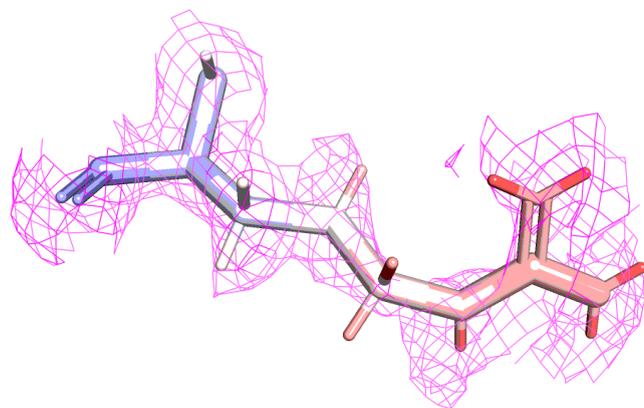
Задание 2. Покраска по b-фактору.



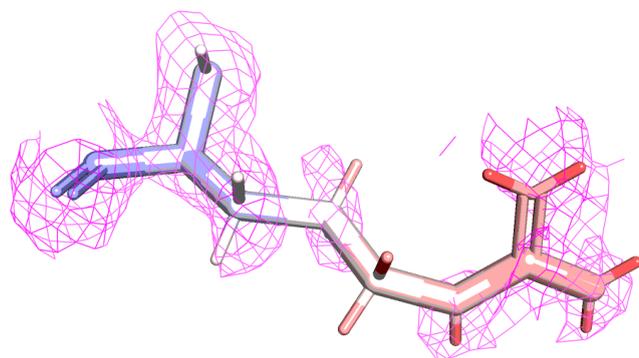
B-фактор является показателем неопределенности пространственного положения атома в молекуле белка. На рисунке синие области соответствуют низкому параметру неопределенности, а красные - высокому. Белый является переходным цветом.

Видно, что анализируемая молекула белка имеет более высокий показатель b-фактора у концевых остатков и в участках молекулы, находящихся на периферии. В центре глобулы наблюдается наиболее низкий показатель b-фактора. Центральные части белка имеют больше взаимодействий между собой, что поддерживает структуру

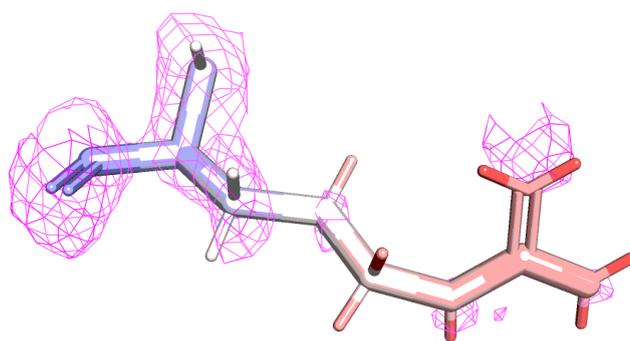
глобулы. У тех петель и остатков, что на периферии, этих взаимодействий меньше, так как там вокруг растворитель. Это может объяснять их большую подвижность. Также был рассмотрен один конкретный остаток, для него была выбрана раскраска по b-фактору, а затем для него получены последовательные изображения электронной плотности на разных уровнях подрезки



Уровень подрезки 0.5



Уровень подрезки 0.75

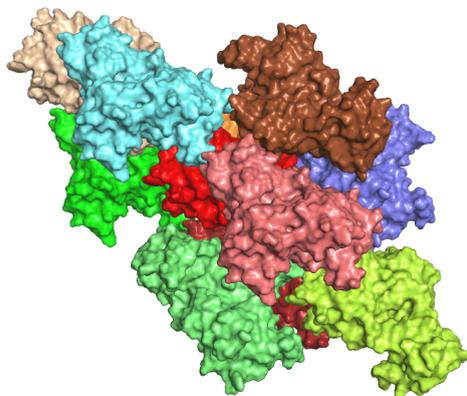


Уровень подрезки 1

Видно, что с увеличением уровня подрезки, на атомах в большом b-факторе, электронная плотность пропадает резче. Это отражает снижение вероятности встретить там электрон, что связано с подвижностью этого конца остатка.

Задание 3.

Структура кристалла.



Красным показана центральная молекула. Она взаимодействует с 10 соседними молекулами