

Задание 1. Сравнение двух кристаллографических расшифровок структур одного и того же белка.

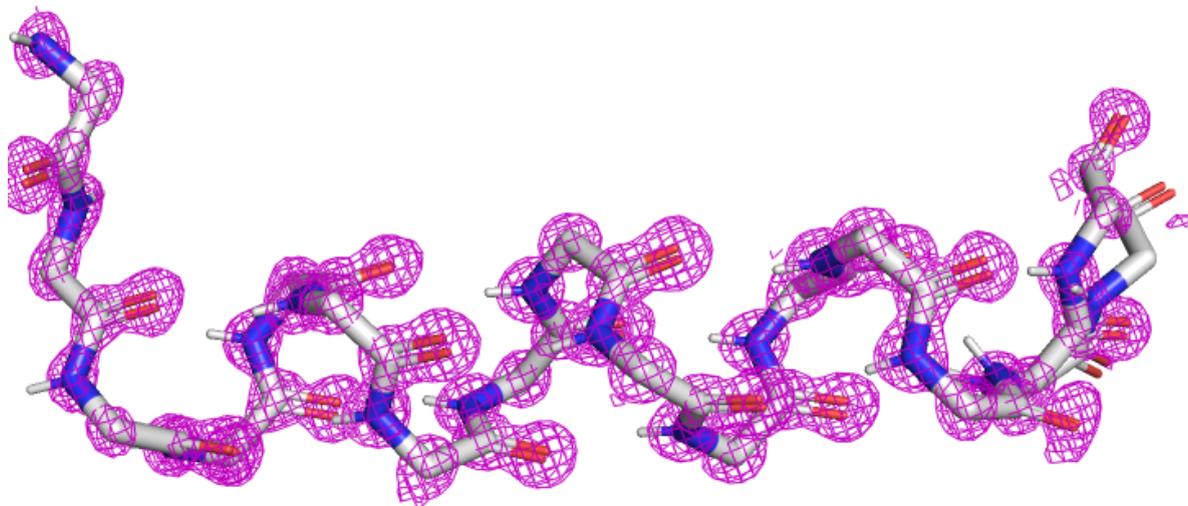


Рисунок 1. Структура PDBID - 4UA6

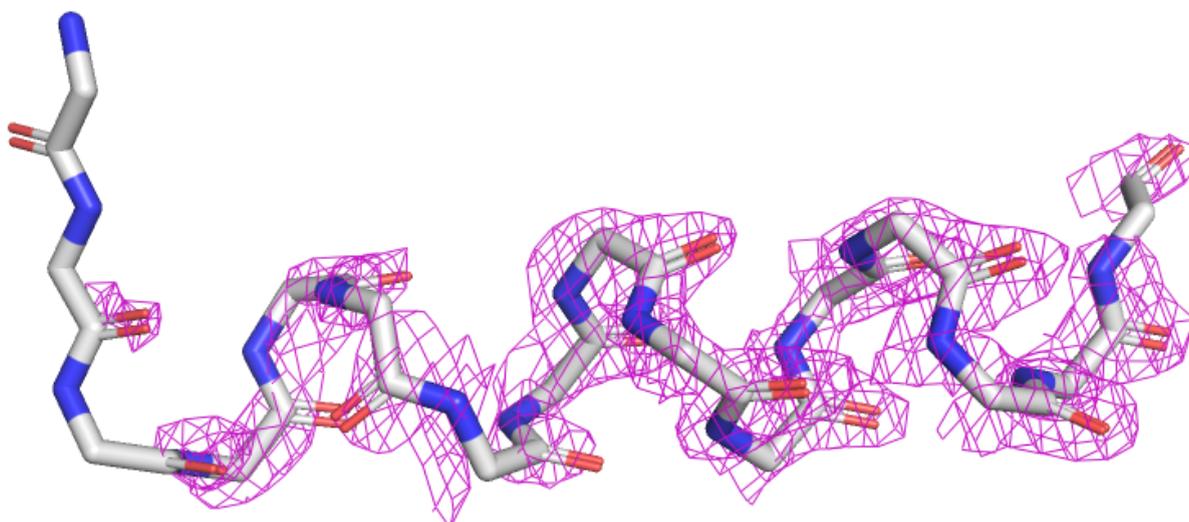


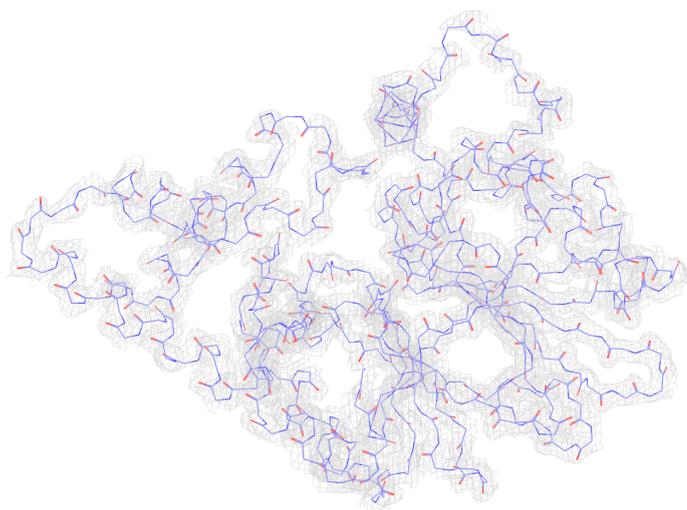
Рисунок 2. Структура PDBID - 6D71

В обоих случаях карта электронной плотности строилась на уровне подрезки 2. Заметно, что первая структура имеет меньшее разрешение, так как на ней видны более тонкие детали. На второй структуре весь остов сливается в единое пятно, тогда как на первой картинке можно разрешить отдельные атомы. По данным с сайта RCSB PDB, разрешение первой структуры - 0.79 Å, а второй - 2.00 Å.

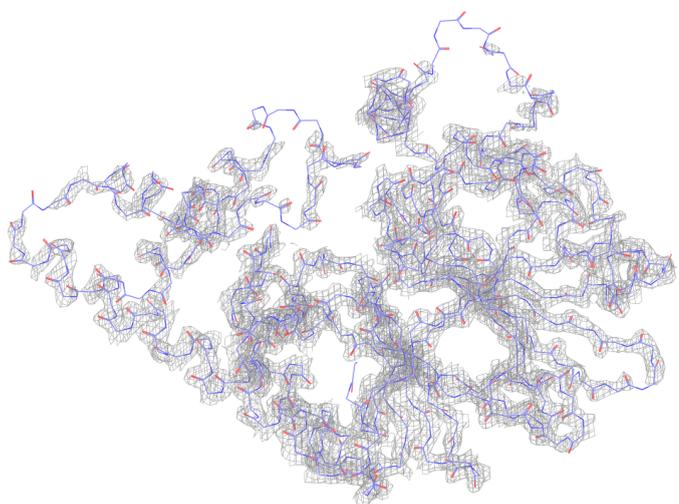
Забавно, что на более точной структуре последняя аминокислота разрешена неоднозначно, но в целом в данном участке на остова различия в структурах как таковой нет.

Задание 2.

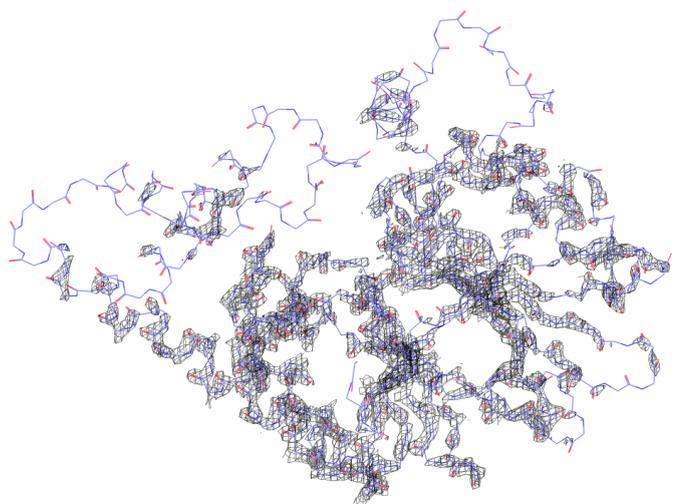
Получены карты электронной плотности вокруг остова на трех уровнях подрезки.



уровень 1

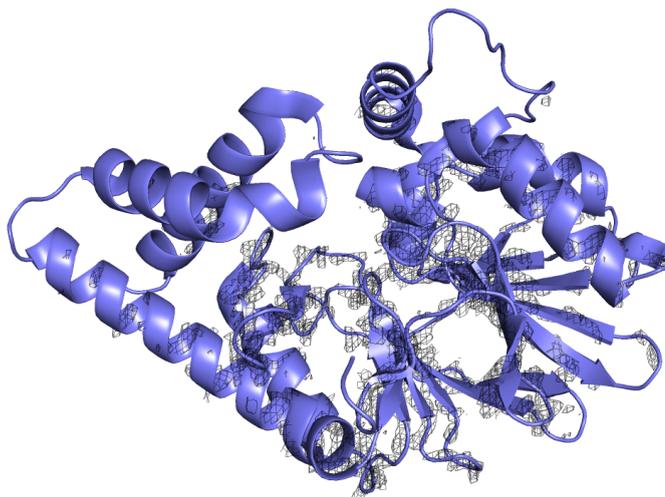


уровень 2



уровень 3

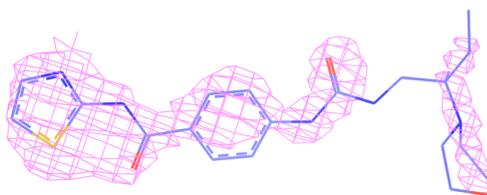
Видно, что с увеличением уровня подрезки пропадают крайние области белка



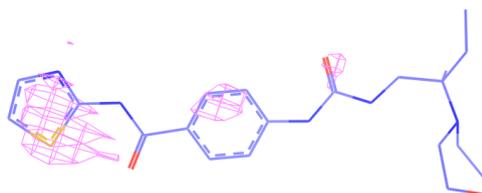
На таком изображении видно, что на большом уровне подрезки остаются центральные области белка, в которых имеется довольно стабильная структура из двух бета-листов. Это можно объяснить большей подвижностью участков структуры, расположенных сбоку. При этом их электронная плотность будет размазана по большему объему пространства, по сравнению с ядром глобулы. Поэтому на большем уровне подрезки она будет пропадать

Задание 3.

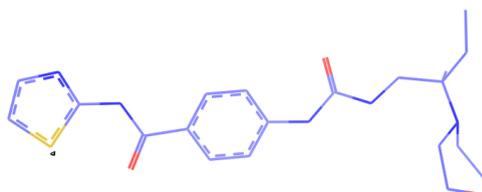
Получена картина электронной плотности вокруг лиганда на трех уровнях подрезки.



Уровень 1



Уровень 2



Уровень 3

Уже на уровне подрезки 2 пропадает большая часть электронных облаков вокруг атомов углерода, а на уровне 3 не видно совсем ничего. Видимо участки с самым стабильным положением в белке - тиазольное и бензольное кольцо. Остальные видимо довольно сильно меняют свое положение, поэтому их не удалось достаточно четко отразить на дифракционной картине. Особенностью этих колец является сопряженная система пи-орбиталей, в которых электроны распределены равномерно между всеми углеродами и гетероатомами в каждом отдельном кольце. Это обеспечивает жесткость этих структур. Сопряженные пи-системы могут взаимодействовать при помощи пи-стекинга, что может стабилизировать их положение в белке. Также электронная плотность дольше сохраняется вокруг серы, которая располагается в 3 периоде.