

Практикум 2. Электронная плотность

Задание 1. ЭП: хорошая и плохая расшифровки.

Для выполнения данного задания брали 2 структуры триозофосфатизомеразы из *Leishmania mexicana* с хорошим (1QDS, 2Å) и очень хорошим (2VXN, 0,82Å) разрешением. Подозреваю, что разница будет не особо видна, но брать другую пару не хочется уже, поэтому будем работать с тем, что взяли.

И действительно, на первый взгляд (моих неопытных глаз), никаких серьезных отличий между двумя структурами не наблюдается. Однако, выровняв структуры, можно заметить, что 2 соседних бета-листа в составе бочки покороче в структуре 2VXN с очень хорошим разрешением и не перекрываются между собой, в отличие от ситуации во второй структуре (рисунок 1). По-видимому, это разница в интерпретации показа вторичной структуры с помощью cartoon, а не разница расшифровки, потому что атомы двух структур на этом участке выровнены почти идеально.

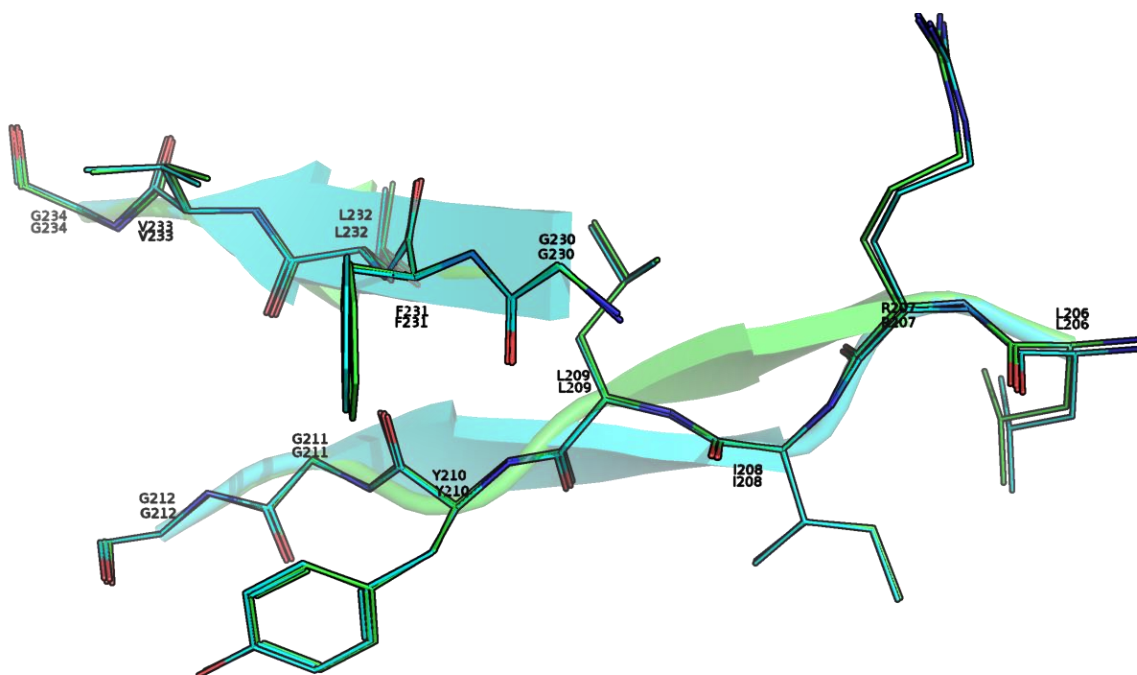


Рисунок 1 Выровненные «отличающиеся» фрагменты структур 1QDS (бирюзовая) и 2VXN (зеленая)

Энивей, посмотрим на электронную плотность на примере этого участка, потому что других отличий все равно нет (рисунок 2). Сразу бросается в глаза, что структура с высоким разрешением позволяет видеть отдельные атомы (рис.2 А,С), в то время как на второй можно проследить ход цепи и аминокислоты различить, но плотность от отдельных атомов сливается в сплошную (рис.2 В,Д).

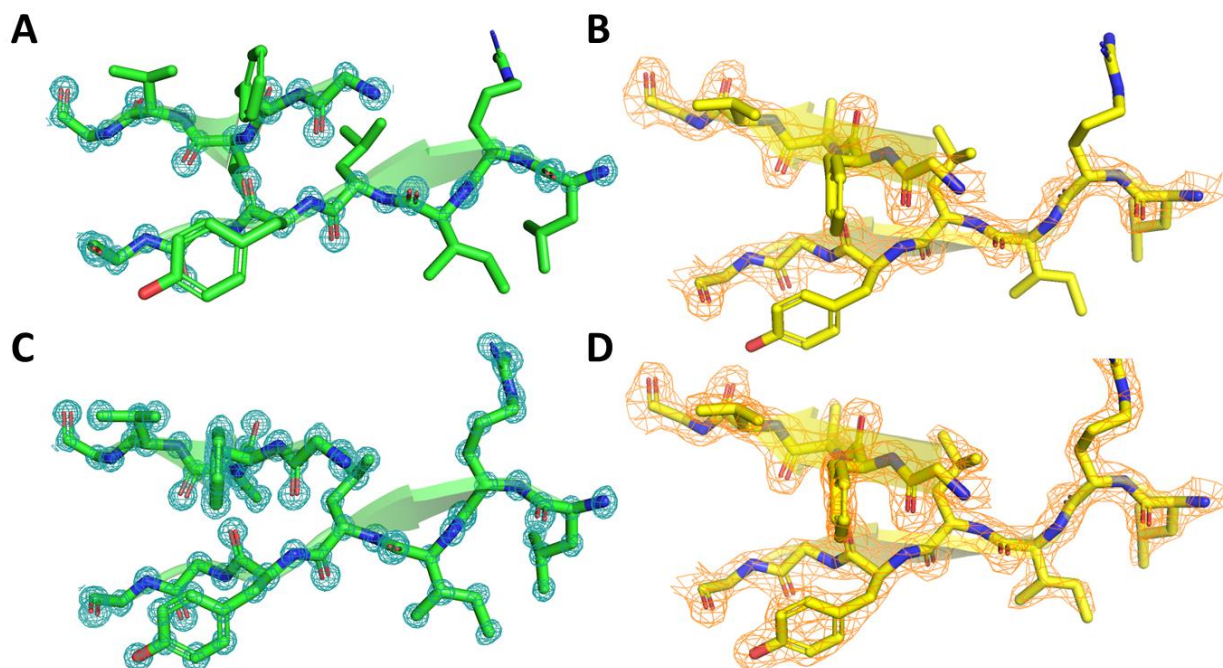


Рисунок 2 Электронные плотности выбранных фрагментов структур с подрезкой $z\text{-score} > 2$. А – 2VXN, плотность для скелета, В – 1QDS, плотность для скелета, С – 2VXN, плотность для всех атомов, D – 1QDS, плотность для всех атомов

Задание 2. ЭП и положение в структуре.

Для того чтобы изучить зависимость ЭП от расположения в белке взяли структуру 1V2Q (трипсин с ингибитором) и смотрели на электронную плотность скелета с различными порогами на $z\text{-score}$ (рисунок 3). Видно, что при увеличении порога в первую очередь пропадает плотность с:

- наружных участков белка (возможно, потому что они более подвижны)
- α атомов, т.к на них электронная плотность меньше, по сравнению с карбонильной группой.

Интересно, что плотность остается не только на кислороде, но и смещается в сторону азота (рисунок 3, правый нижний). Подозреваю, это результат делокализации электрона в пептидной связи.

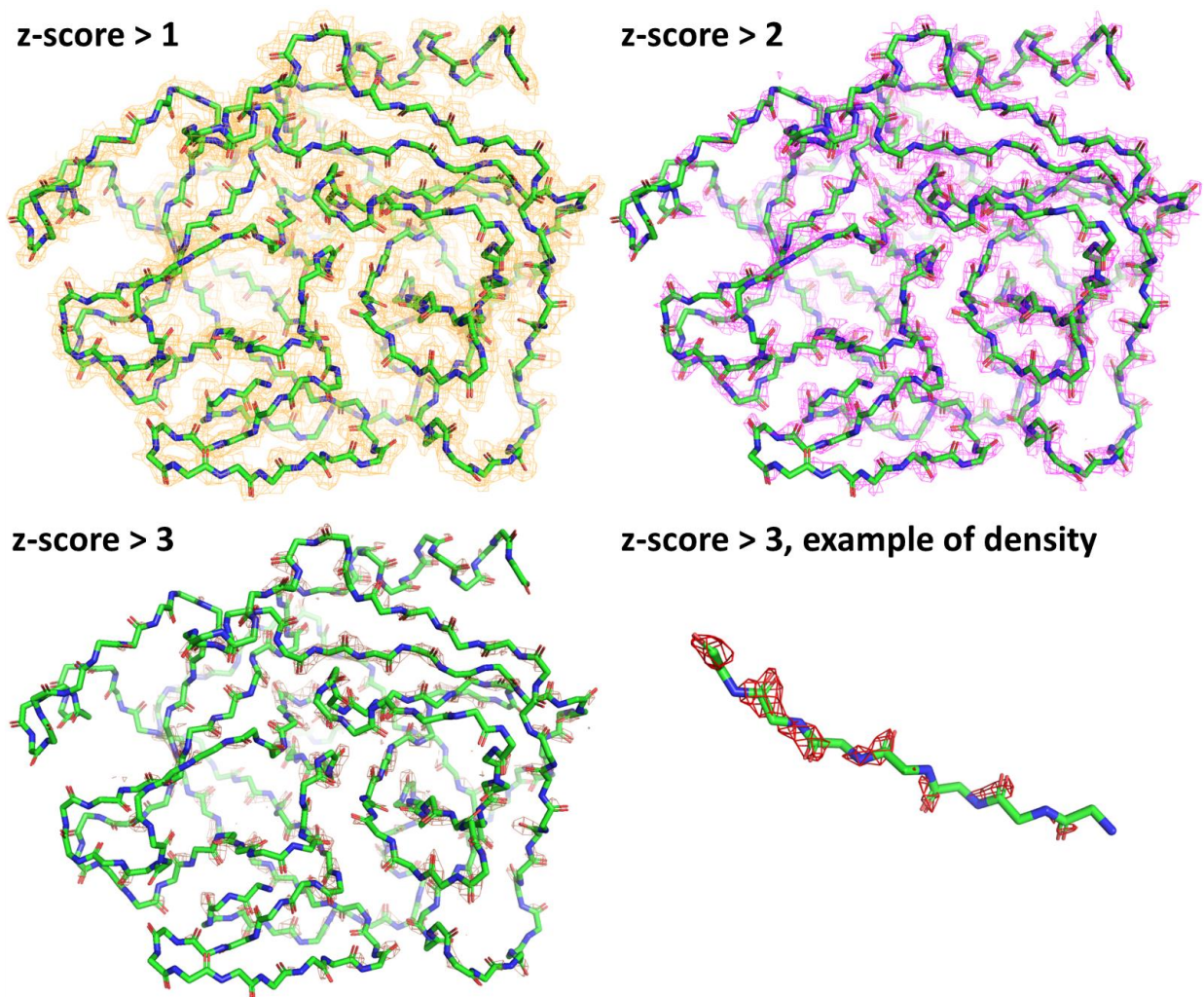


Рисунок 3 Электронная плотность и положение в структуре

Задание 3. ЭП и типы атомов.

Таким же способом рассмотрели зависимость электронной плотности лиганда (ингибитор трипсина со сложным названием) от типов атомов (рисунок 4). С порогом 1 покрыты не все атомы лиганда. Остаются непокрытыми азот около атома серы (наверное потому что все электроны оттягивает на себя сера и кислороды при ней). С порогом 2 плотность остается только у серы с кислородами, у amino-иминовой группировки (не помню, как ее правильно назвать) +немного у атомов кольца, в котором она является заместителем. и у амидной связи. При повышении порога до 3 плотность остается только у первых двух. Таким образом, плотность зависит как от количества электронов в атоме, так и от его электроотрицательности и окружения: например, азот у амидной связи покрыт на уровне подрезки 2, а азот рядом с серой – нет.

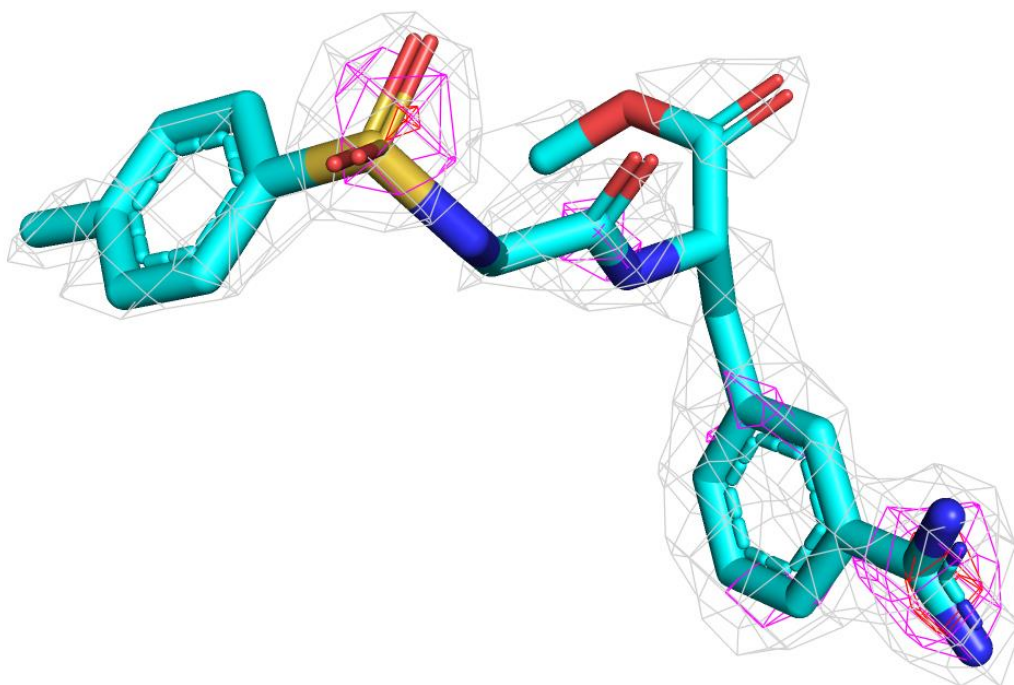


Рисунок 4 Электронная плотность лиганда из 1V2Q. Раскраска соответствует различным порогам: серый - 3, сиреневый - 2, красный - 1.