

Альтернативные положения, B фактор, кристалл

Задание 1. Альтернативные положения

PDB ID: 6AAO

Целью данного задания было показать какие взаимодействия стабилизируют альтернативные конформации (альтлоки) заданного остатка (в моем случае это Arg356 в цепи A в структуре 6AAO).

Аргинин – алифатическая основная α -аминокислота, имеющая положительный заряд при нейтральном pH.

Водородные связи образуются на довольно близком расстоянии (примерно до $\sim 3 \text{ \AA}$). При рассмотрении альтернативных конформаций заданного остатка мне удалось обнаружить водородные связи в обоих из них, причем длина связи в обоих случаях совпала.

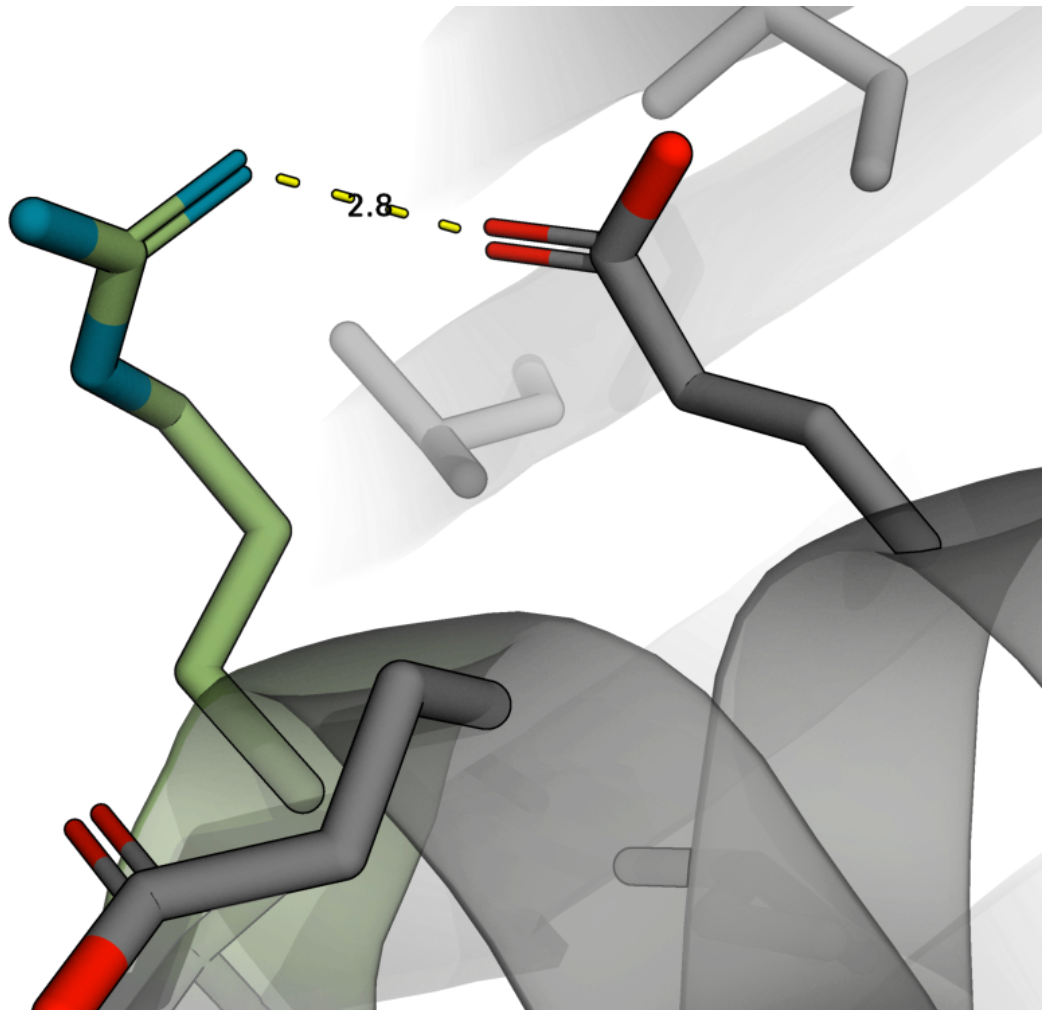


Рис 1. Альтлок А остатка Arg356 из структуры 6ААО. Синим выделены атомы азота, красным - кислорода. Водородные связи выделены желтым. Длина водородной связи с остатком Glu360 - 2.8 ангстрем

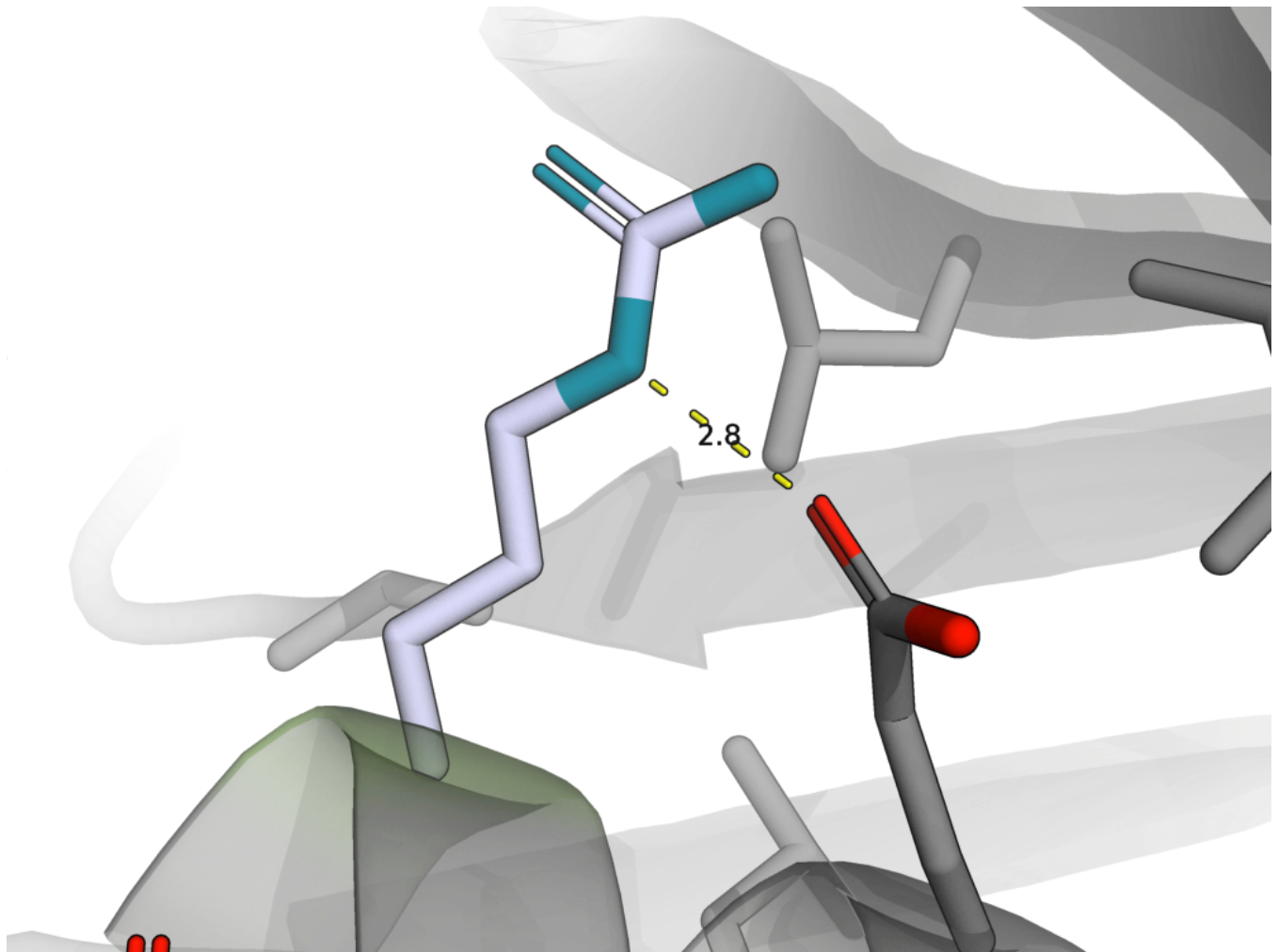


Рис 2. Альтлок В остатка Arg356 из структуры 6ААО. Синим выделены атомы азота, красным - кислорода. Водородные связи выделены желтым. Длина водородной связи с остатком Glu360 - 2.8 ангстрем

Данные по населенности (occipancy) говорят о примерно одинаковой стабильности альтлоков А и В (оба альтлока населены на 50%). Исходя из того, что я увидела, данные кажутся мне правдоподобными.

Задание 2. В-фактор

Целью данного задания было рассмотреть распределение В-факторов атомов остова. Для этого задания был использован тот же PDB ID.

В-фактор - это характеристика атома или групп атомов, описывающая степень 'размазывания' электронной плотности. Подобное размазывание является следствием тепловых и других эффектов, которые способствуют увеличению подвижности атомов. В-фактор выше в тех областях, которые более подвижны и отдалены от центра молекулы. Это можно наблюдать на рисунке 3 - остатки на периферии окрашены в красный (высокий В-фактор) и имеют наибольшую подвижность, тогда как участки внутри молекулы малоподвижны и окрашены в основном в синий (низкий В-фактор).

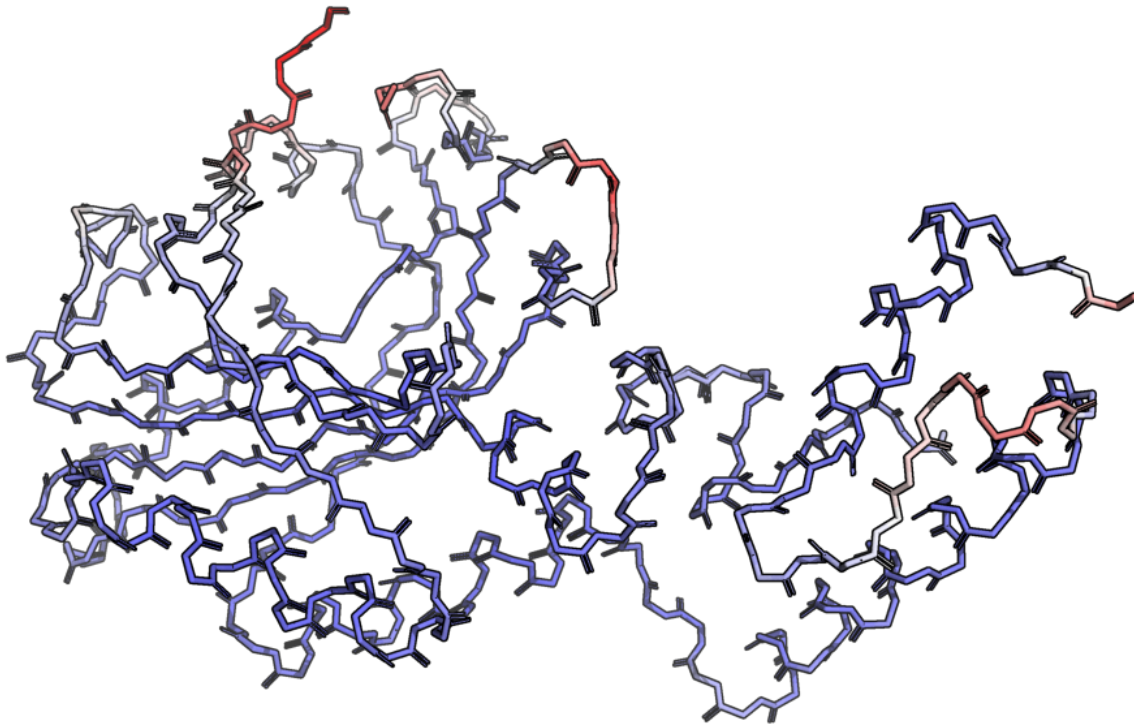


Рис 3. Остов структуры БААО окрашенный по В-фактору: атомы с высоким В-фактором окрашены в красный, с низким - в синий.

Далее нужно было выбрать остаток с высоким В-фактором. Я решила взять MET-382. Он окрашен в ярко-красный, что говорит о том, что атомы бокового радикала очень подвижны. Для взятого остатка была визуализирована электронная плотность на разных уровнях подрезки. При рассмотрении полученных результатов заметно, что электронная плотность в первую очередь пропадает с наиболее подвижной части остатка и дольше всего остается на малоподвижных, синих участках. Скорее всего это можно объяснить тем, что подвижность атомов приводит к размыванию электронной плотности и таким образом в каждой точке пространства ее становится меньше. Также видно, чем больше уровень подрезки, так ближе к остову располагаются участки электронной плотности. В-фактор в то же время также уменьшается при

приближении к остову. Таким образом можно сказать, что чем подвижнее остаток (чем больше размазана электронная плотность), тем меньший уровень подрезки нам нужен, чтобы увидеть покрытие молекулы электронной плотностью.

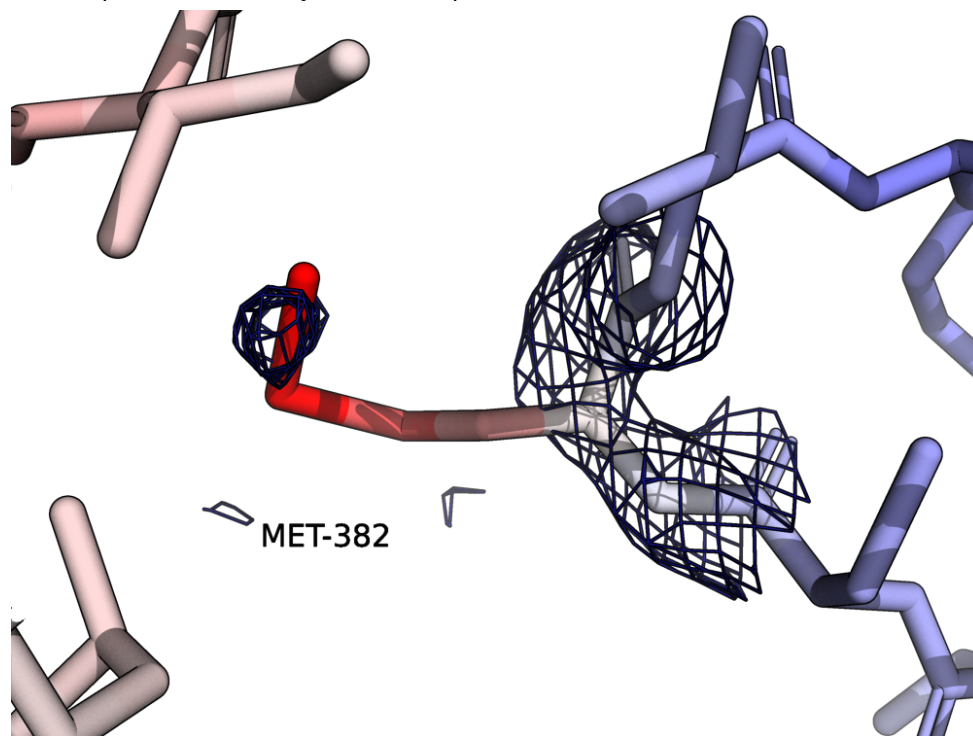


Рис 4. MET-382, окрашенный по B-фактору. Синий цвет – малая подвижность, белый — средняя, красный — высокая. Электронная плотность показана в виде mesh. carve=2, level=1.0

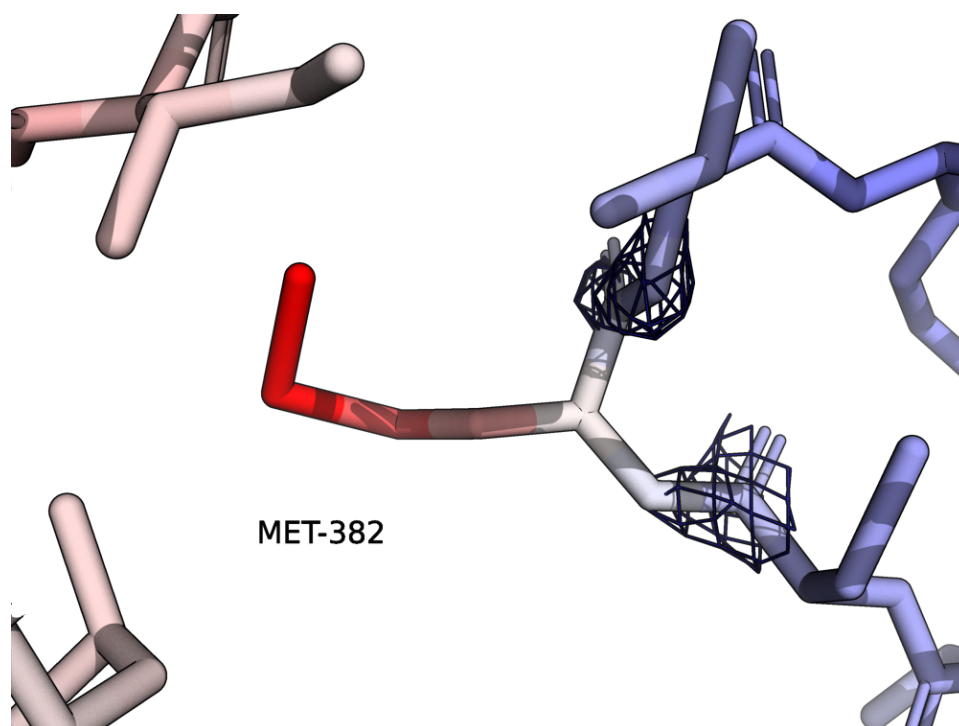


Рис 5. MET-382, окрашенный по B-фактору. Синий цвет – малая подвижность, белый — средняя, красный — высокая. Электронная плотность показана в виде mesh. carve=2, level=2.0

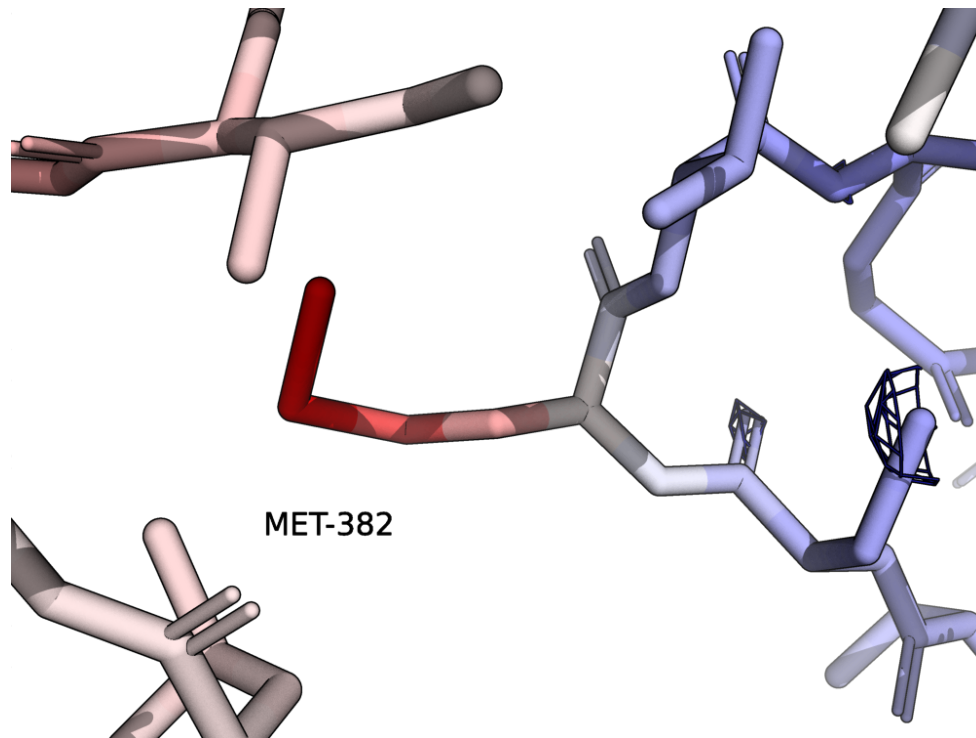


Рис 6. MET-382, окрашенный по B-фактору. Синий цвет – малая подвижность, белый — средняя, красный — высокая. Электронная плотность показана в виде mesh. carve=4, level=3.0

Задание 3. Соседи

В этом задании нам нужно было восстановить кристалл, частью которого является заданный белок (PDB ID 6AAO).

Сначала была восстановлена кристаллическая структура с помощью команды

```
symexp 6AAO_, 6AAO, all, 20
```

Ниже на картинке представлен результат работы.

Далее были выбраны соседи белка, с которыми он взаимодействует. Они были окрашены в разные цвета. Результат работы представлен на рисунке 8. В общем было обнаружено 11 соседей по кристаллу.

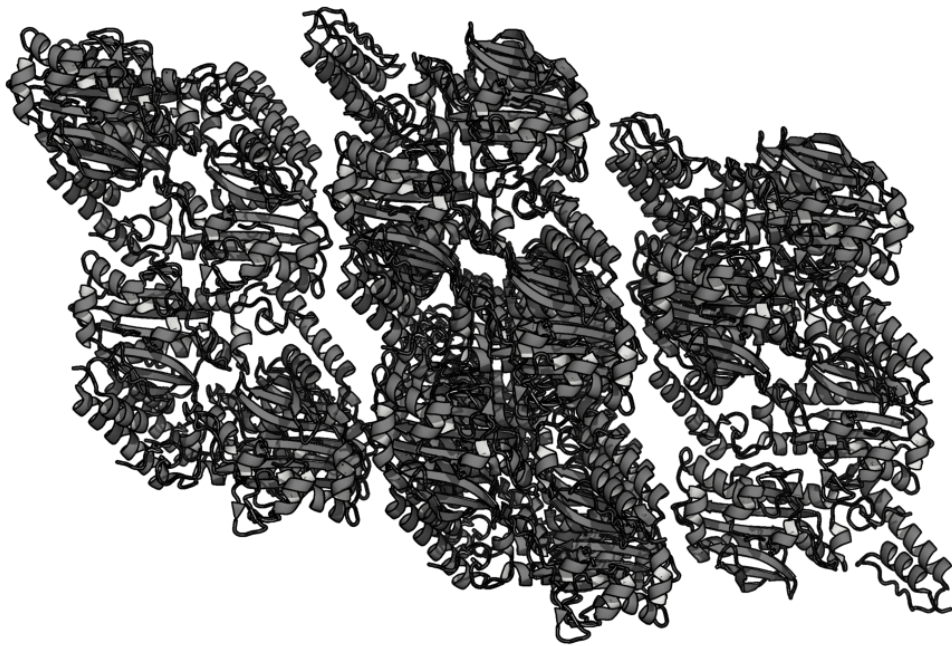


Рис 7. Восстановленная структура кристалла (отсечка в 20 ангстрем).

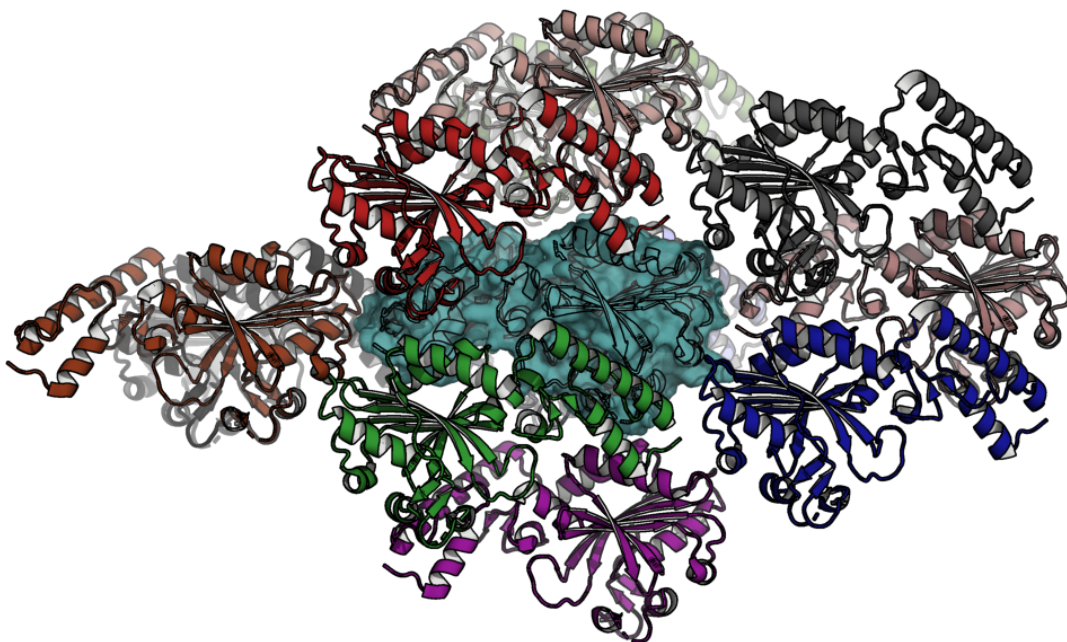


Рис 8. Ближайшие соседи структуры БААО. Бирюзовым цветом показан изначальный белок.