

Задание 1

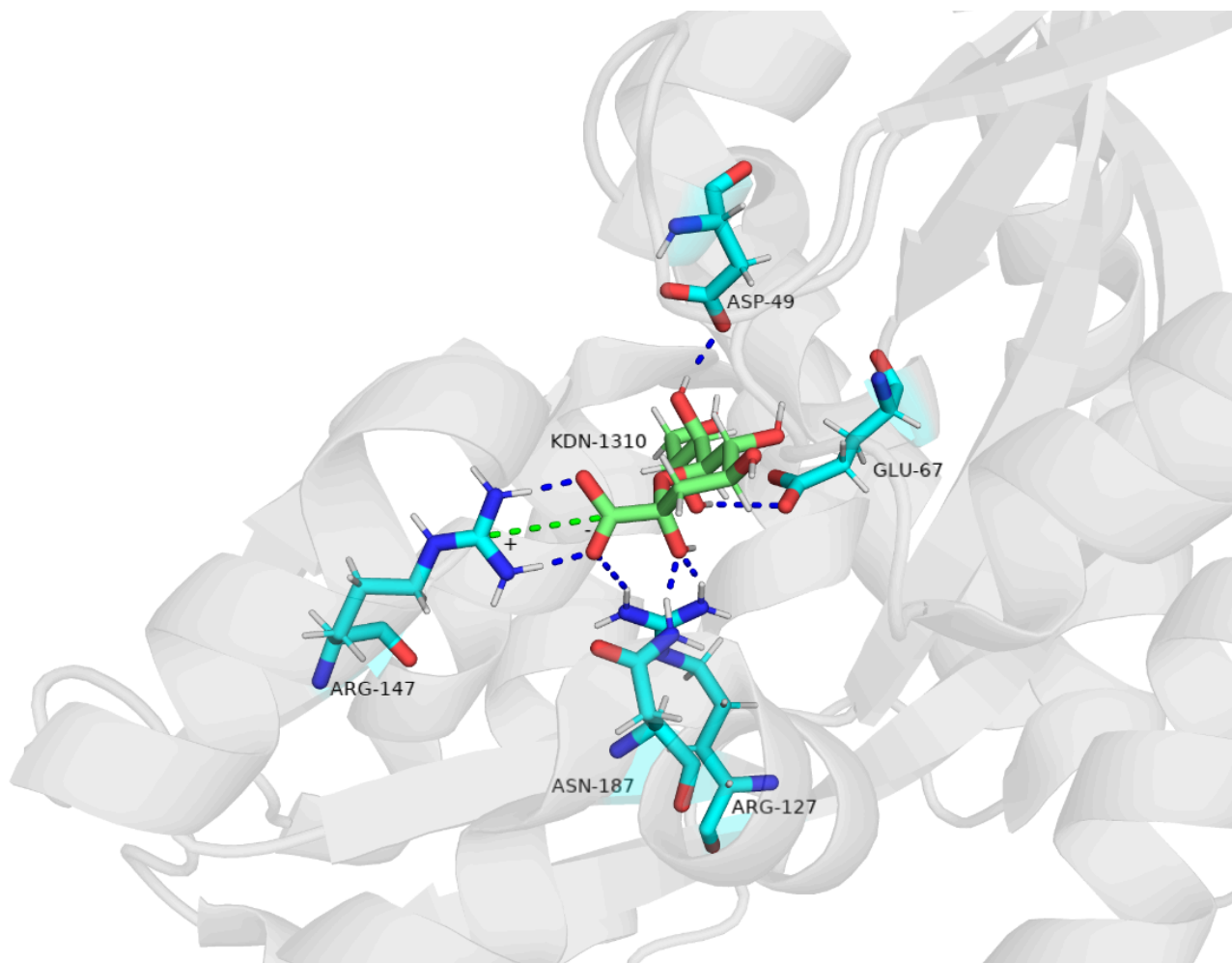


Рис. 1. Структура комплекса белка, связывающего сиаловую кислоту, и лиганда KDN-1310, отрисованная в PyMol.

На рисунке 1, отражающем структуру из PDB с идентификатором 2v4c, атомы углерода лиганда показаны зеленым, атомы углерода аминокислотных остатков, с которыми лиганд потенциально взаимодействует показаны бирюзовым, остальные атомы отображены в соответствии с общепринятой цветовой схемой: кислород - красным, азот - синим, водород - белым. Белым цветом на заднем фоне также показан ход вторичной структуры белка. Потенциальные водородные связи показаны синим пунктиром, потенциальная ионная связь (солевой мостик) - зеленым пунктиром. Детально показаны лиганд и аминокислотные остатки, которые потенциально могут с ним взаимодействовать.

Критерии для водородной связи - расстояние между атомами донора и акцептора менее 3.5 Å, угол между атомом, предшествующем акцептору,

атомом-акцептором и атомом-донором водородной связи $> 100^\circ$ [1]. Критерий для ионной связи - расстояние между противоположно заряженными группами менее 4\AA [2].

Сессия PyMol, в ходе которой был получен рисунок 1 доступна по [ссылке](#).

Задание 2

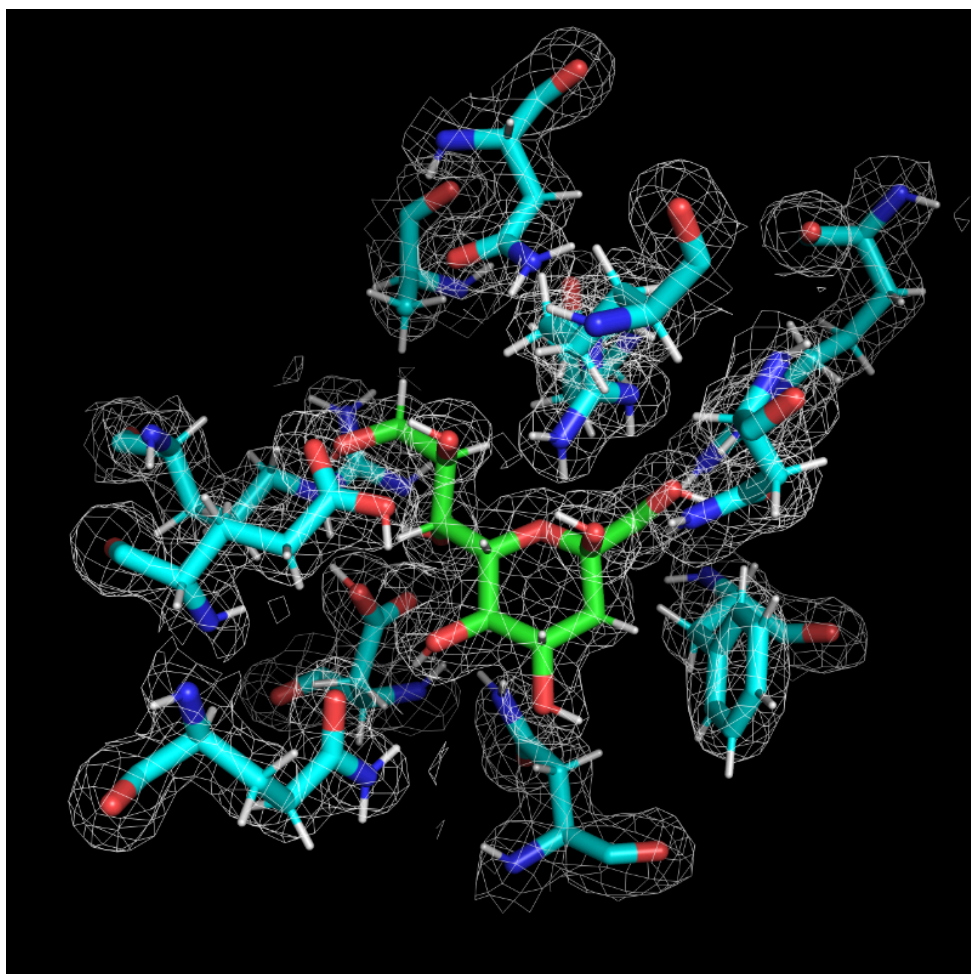


Рис. 2. Карта электронной плотности структуры PDB 2v4c в районе лиганда и окружающих его остатков.

На рисунке 2 показаны лиганд KDN-1310 и аминокислотные остатки белка, находящиеся от него на расстоянии не более 4\AA , а также их покрытие электронной плотностью. Использована та же цветовая схема, что и на рисунке 1. Можно сделать вывод, что лиганд и аминокислотные остатки вблизи него примерно одинаково хорошо покрыты электронной плотностью.

Сессия PyMol, в ходе которой был получен рисунок 2 доступна по [ссылке](#).

Список литературы

1. Tan, K. P., Singh, K., Hazra, A., & Madhusudhan, M. S. (2020). Peptide bond planarity constrains hydrogen bond geometry and influences secondary structure conformations. *Current research in structural biology*, 3, 1–8.
<https://doi.org/10.1016/j.crstbi.2020.11.002>
2. https://proteopedia.org/wiki/index.php/Salt_bridges