**МИНОБРНАУКИ РОССИИ**

**Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования**

**«Южный федеральный университет»**

Физический факультет

Кафедра нанотехнология

**Лабораторная работа**

«Расчет центров масс и центров зарядов белков»

**Выполнил:**

Студент *Москалёв Кирилл Геннадьевич*

Курс М-1 Группа 9

**Цель**: рассчитать центры масс и зарядов белков вируса.

**Задачи:**

- Ознакомиться с литературой о строении вирусов.

- Рассчитать центры масс белков.

- Рассчитать центры зарядов белков при водородном показателе pH=7.

**Ход работы**

В качестве исследуемого вируса был выбран Physalis Mottle Virus 1QJZ. Данный вирус имеет симметрию икосаэдра.

|  |
| --- |
| *Рисунок 1 – Уточненная структура вируса 1QJZ* |

Используя данные о вирусе, скачанные из протеинового банка данных, был произведен расчет центров масс белков. Было выяснено, что данный вирус имеет 3 типа белков (A, B, C).

Для расчета центра масс воспользуемся формулой 1:

(1).

Результаты расчетов приведены ниже:

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| Координаты | Х | Y | Z |
| Белок А | -5.86 | 46.18 | 119.97 |
| Белок B | 8.6 | 31.47 | 121.41 |
| Белок С | -0.56 | 24.38 | 122.34 |
|  |  |  |  |

*Таблица 1 – Центры масс белков вируса 1QJZ*.

Для расчета центров зарядов воспользуемся формулой 2:

(2).

Чтобы рассчитать заряды воспользуемся формулой 3:

(3),

где pH берется равным 7, а pKα – константа. pKα  была взята из литературы (таблица 2).

|  |
| --- |
|  |

*Таблица 2 – Значения pKα  для отдельных аминокислот.*

Воспользовавшись формулами 2 и 3 и таблицей 2, произвели расчет центров зарядов белков. Результаты приведены в таблице 3.

|  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- |
|  | Координаты | Белок A | Белок B | Белок C |
| pH=7 | x | -13.14 | 0.84 | -3.29 |
| y | 45.47 | 33.24 | 28.03 |
| z | 115.83 | 119.6 | 121.49 |

*Таблица 3 – Результат расчета центров зарядов белков 1QJZ.*

**Вывод**: В ходе выполнения работы были рассчитаны центры масс и зарядов белков вируса Physalis Mottle Virus 1QJZ. Выяснено, в результате сравнения, что белки находятся в кислой среде.