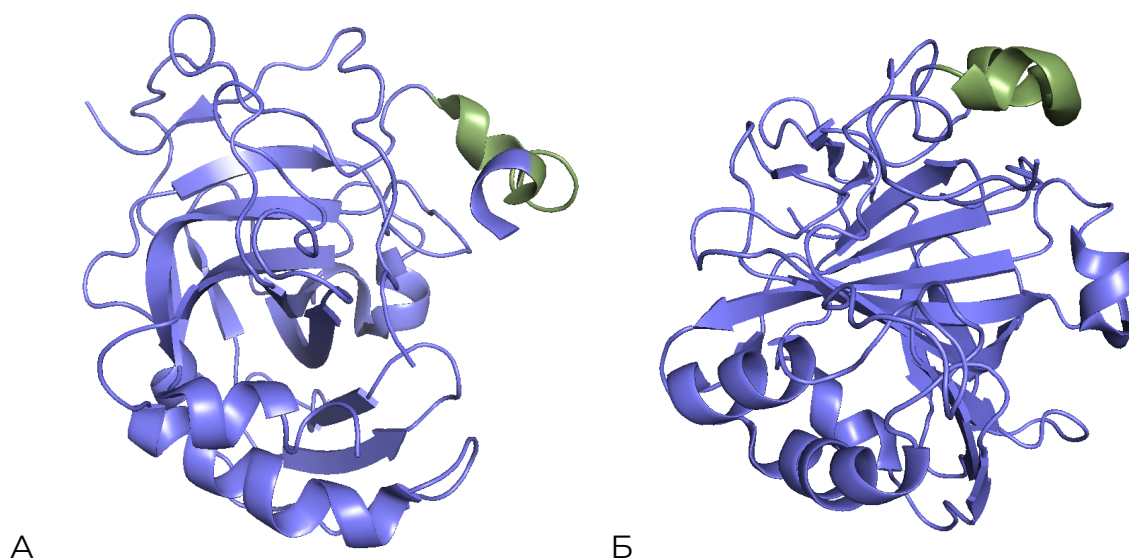


Практикум 2. Электронная плотность.

1. ЭП: хорошая и плохая расшифровки.

В данном задании будут рассматриваться две структуры (PDB ID: 3K34, 6Q9T) карбоангидразы II, снятых в разном качестве.



А

Б

Рис.1. Структуры карбоангидразы II. Зеленым цветом выделены соответствующие альфа-спирали (15-25 а.о.), в укладке которых явно видны различия. А) 6Q9T Б) 3K34

Вторичные структуры изображены на рисунке 1. Видно, что в целом структуры схожи, но различия в укладке альфа-спиралей и бета-слоев видны.

Рассмотрим различия в электронной плотности в выделенных зеленым цветом альфа-спиралях (рис.1).

Обе электронные плотности рассматривались на уровне подрезки 1. Электронная плотность структуры 3K34 (рис.2Б.) образует непрерывную область с четко выраженными шарами для каждого атома остова. Электронная плотность 6Q9T сильно прерывистая, покрывает далеко не все атомы остова. Это говорит о том, что разрешение 3K34 гораздо ниже, чем разрешение 6Q9T. Действительно, в PDB записи 3K34 указано разрешение 0.90 Å, а у 6Q9T 2.68 Å, что согласуется с моими выводами.

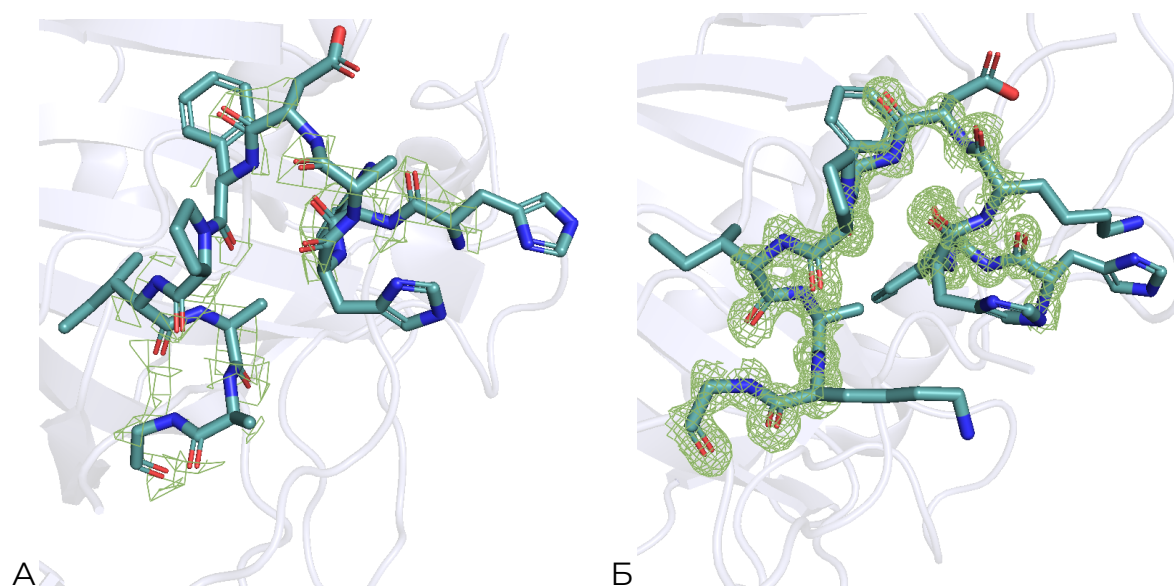


Рис.2. Электронные плотности вокруг 15-25 остатков структур карбоангидразы II.
А) 6Q9T Б) 3K34

PyMol сессии для данного задания: 3K34.pse, 6Q9T.pse.

2. ЭП и положение в структуре.

В данном задании рассматривалась электронная плотность остова 2PIU на разных уровнях подрезки (рис.3-5).

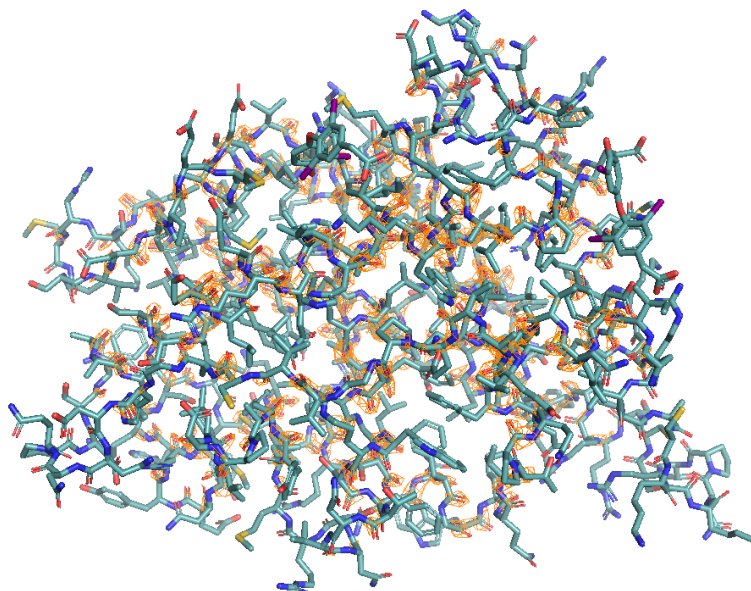


Рис.3. Электронная плотность вокруг атомов остова структуры 2PIU.
Уровень подрезки 3.

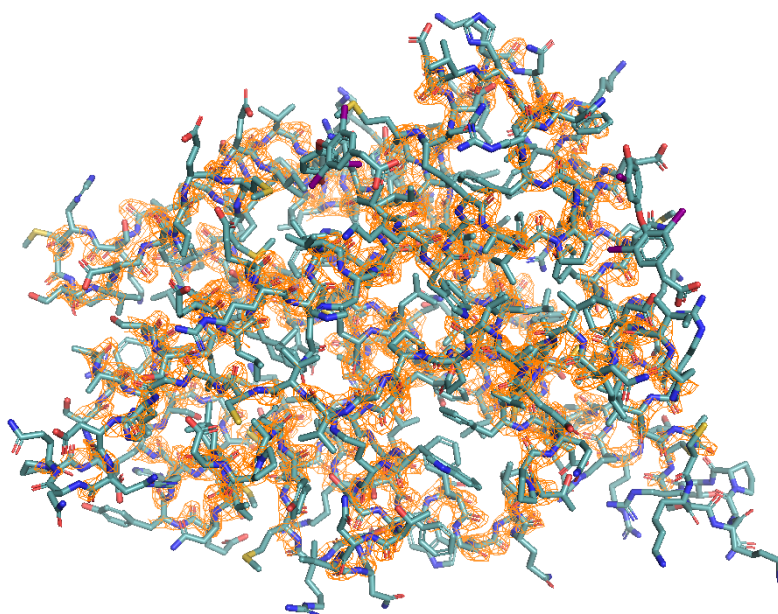


Рис.4. Электронная плотность вокруг атомов остова структуры 2PIU.
Уровень подрезки 2.

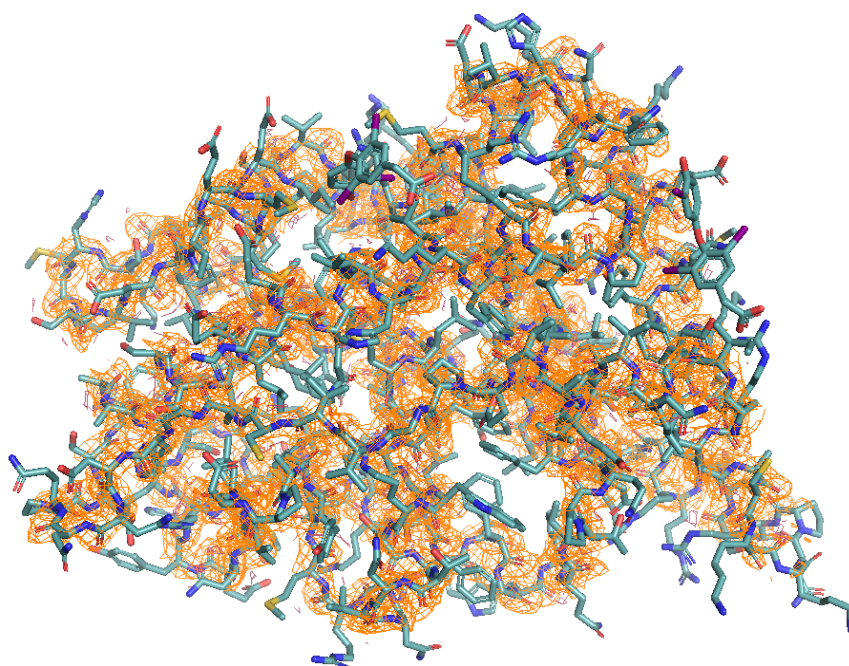


Рис.5. Электронная плотность вокруг атомов остова структуры 2PIU.
Уровень подрезки 1.

Видно, что с увеличением уровня подрезки, электронная плотность особенно уменьшается на краевых участках структуры. Это связано с тем, что остатки, находящиеся на поверхности структуры достаточно

подвижны. Из-за этого их электронная плотность несколько “размазывается” в пространстве и соответственно на больших уровнях подрезки подрезки отрезается вместе с фоном.

3. ЭП и типы атомов.

В данном задании для той же структуры 2PIU рассмотрим электронную плотность вокруг лиганда на разных уровнях подрезки (рис 6-8).

Электронную плотность будем рассматривать на лиганде 4HY (или 2-[4-(4-hydroxy-3-iodo-phenoxy)-3,5-diiodo-phenyl]ethanoic acid).

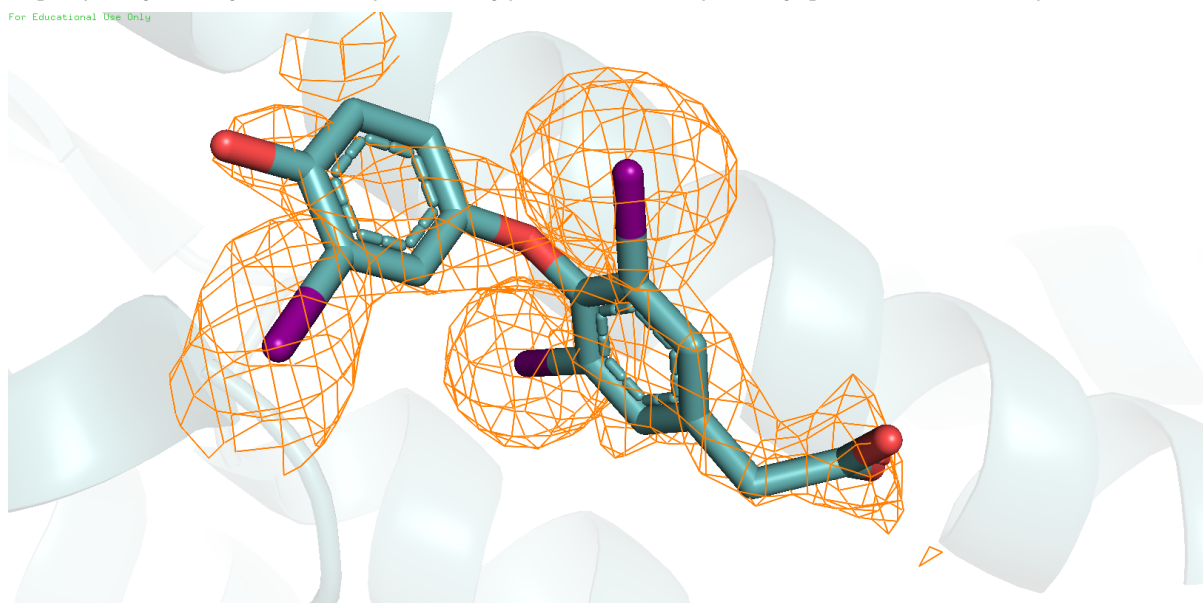


Рис.6. Электронная плотность вокруг атомов лиганда структуры 2PIU.
Уровень подрезки 1.

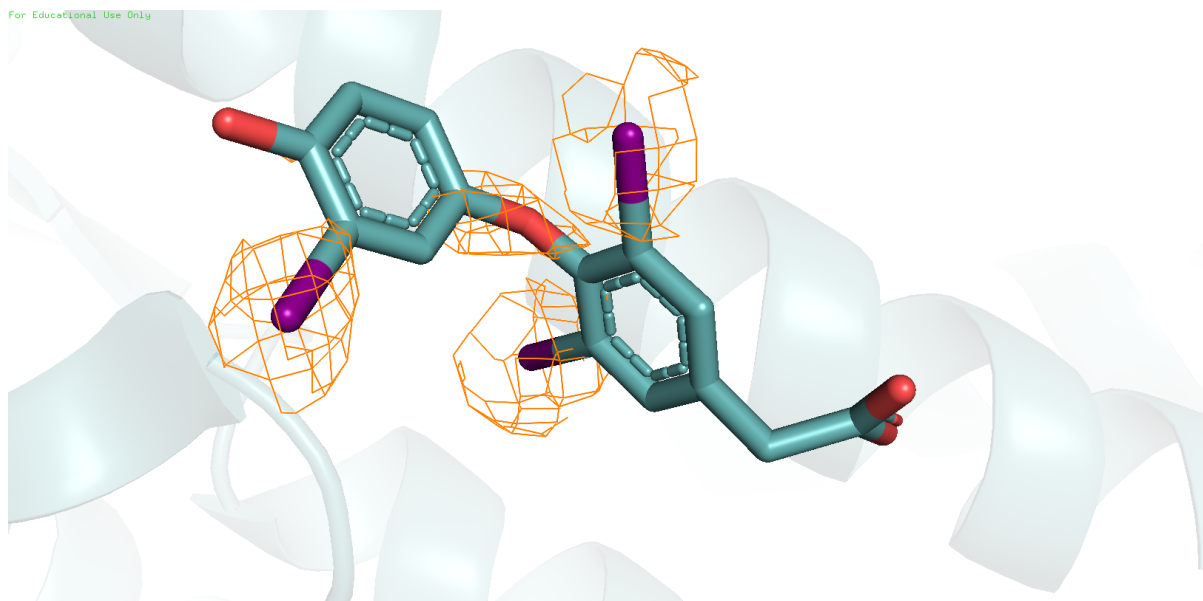


Рис.7. Электронная плотность вокруг атомов лиганда структуры 2PIU.
Уровень подрезки 2.

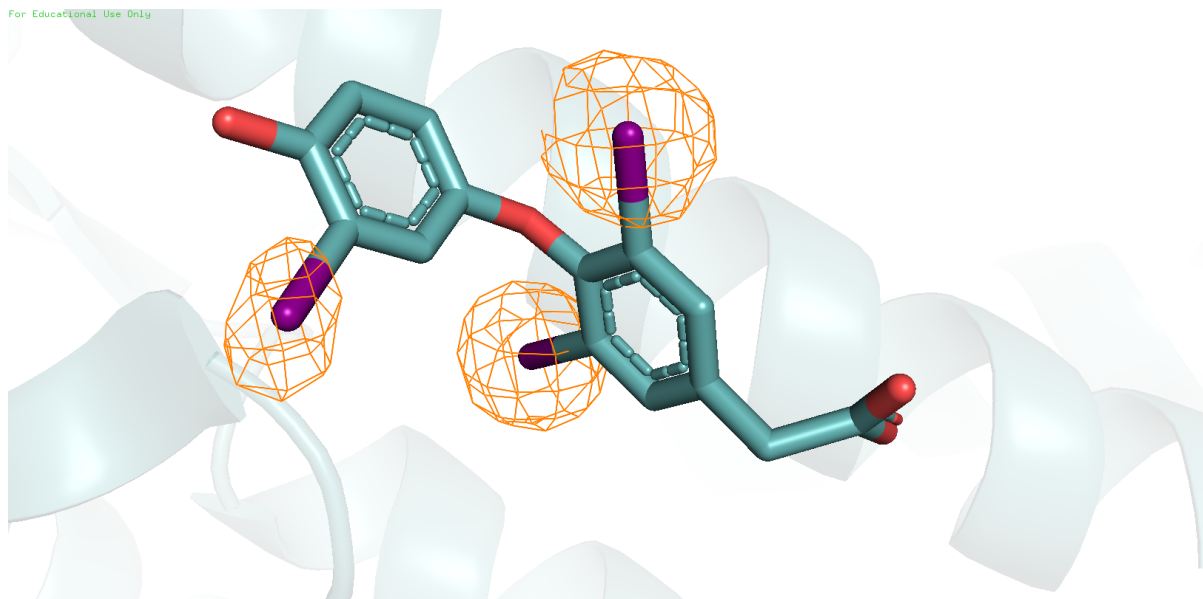


Рис.8. Электронная плотность вокруг атомов остова структуры 2PIU.

Уровень подрезки 3.

На уровне подрезки 1 все атомы лиганда покрыты электронной плотностью. При увеличении уровня подрезки, электронная плотность остается только на атомах йода. Это объясняется тем, что йод сам по себе имеет большое количество электронов, а значит будет порождать большую электронную плотность, которая соответственно будет видна на большом уровне подрезки.

PyMol сессию для 2 и 3 заданий можно найти по ссылке: 2piu.pse.