

## Практикум 3. Стабилизирует ли лиганд взаимодействующие с ним петли белка? В-факторы.

В данном практикуме оценивалось влияние наличия лиганда на значение В-фактора аминокислотных остатков соответствующего сайта связывания на примере структуры нанотела верблюда VHH T9. В анализе рассматривались структура VHH T9 в комплексе с триклокарбаном (PDB 5VM0) и свободная форма нанотела верблюда VHH T9 (PDB 5VLV).

### 1. Оценка “на глаз”.

В PDB записи 5VM0 структура VHH T9 в комплексе с триклокарбаном представлена в виде димера. Рассматривался только А мономер.

В PyMol были выделены аминокислотные остатки в радиусе 5 Å от лиганда. Выделенные а.о. представлены на рисунке 1.

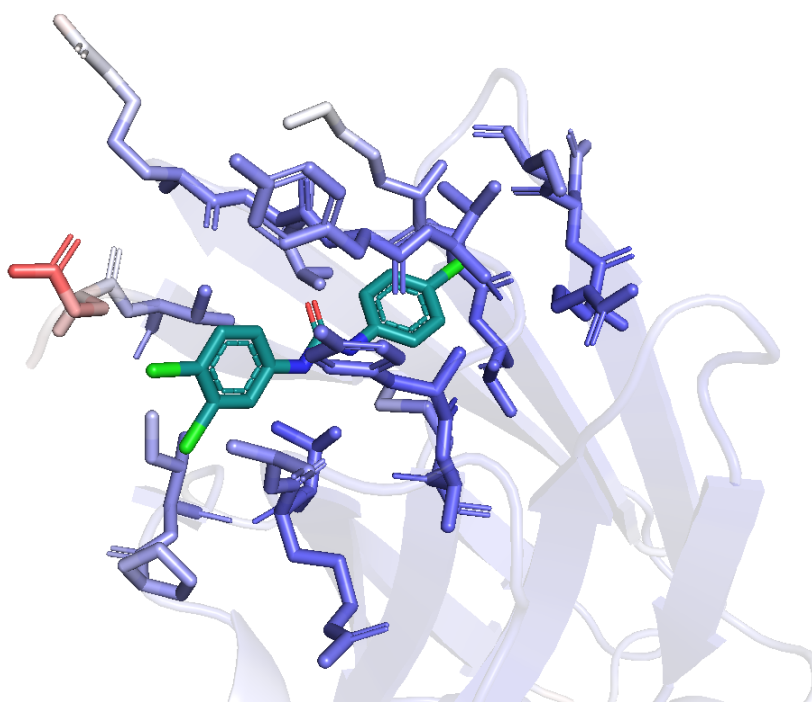


Рис. 1. Триклокарбан в комплексе с VHH T9 (PDB 5VM0). Аминокислотные остатки в радиусе 5 Å от лиганда показаны в виде sticks. Структура белка покрашена по В-фактору.

Номера аминокислот вблизи лиганда:

3, 4, 26, 29, 30, 31, 32, 34, 35, 36, 74, 75, 76, 79, 80, 81, 100, 101, 102, 114, 115.

Всего 20 аминокислотных остатков.

Те же 20 остатков были выделены в PDB записи свободной формы белка (рис.2.).

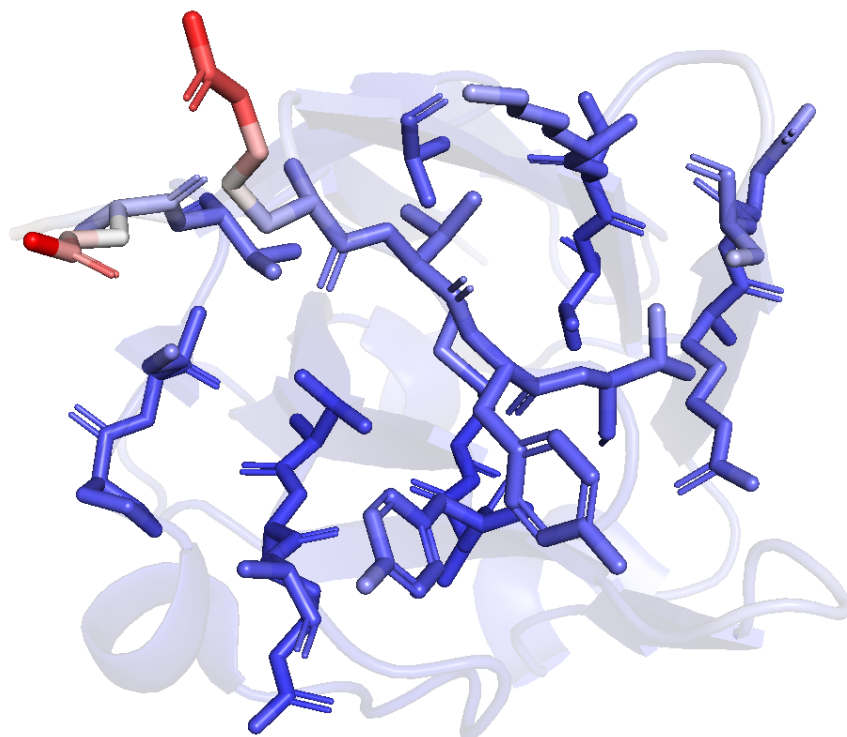


Рис. 2. Свободная форма VHH T9 (PDB 5VLV). Аминокислотные остатки, определенные по структуре 5VM0 показаны в виде sticks. Структура белка покрашена по B-фактору.

В отсутствии лиганда положение аминокислотных остатков как будто несколько изменилось, но описать “на глаз” перемещение сложно.

Видно, что окраска по B-фактору заметно изменилась. Но, так как цветовая шкала задается от минимального значения внутри выделения до максимального значения внутри выделения, то сравнивать окраски двух разных выделений не особо имеет смысла.

## 2. Оценка с помощью python.

Чтобы правильно сравнить B-факторы двух структур, воспользуется питоновской библиотекой [ProDy](#) для получения Z-score.

На рисунке 3 представлена диаграмма рассеяния для получившихся Z-score структур.

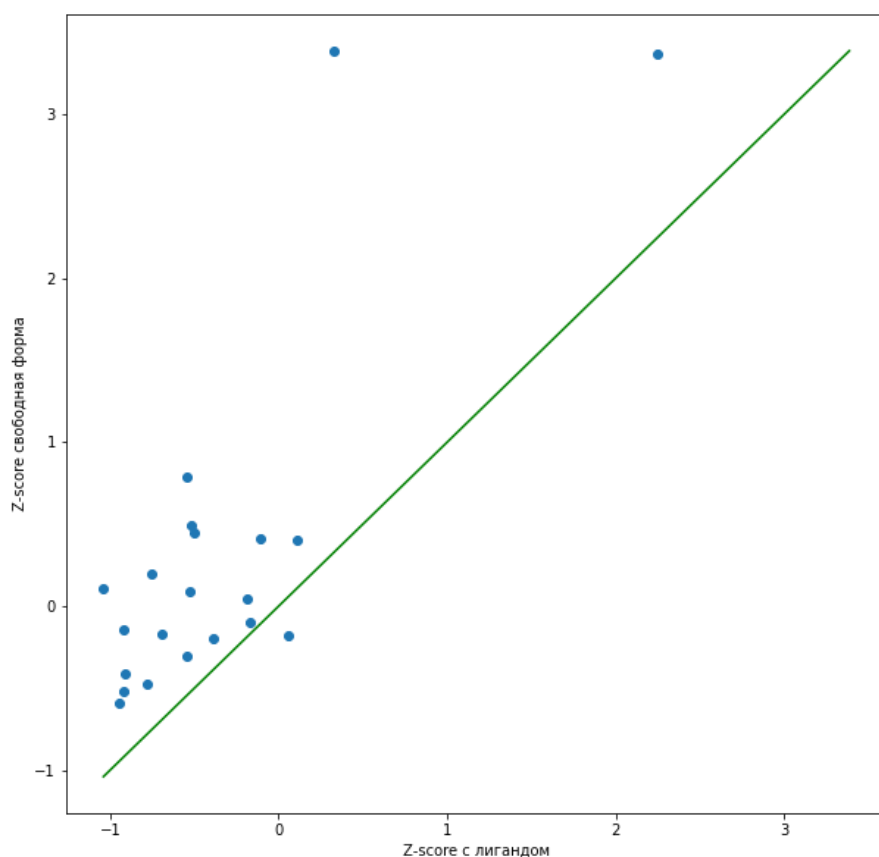


Рис. 3. Диаграмма рассеяния для z-score B-факторов остатков вблизи места связывания лиганда для структур 5VM0 и 5VLV.

Видно, что B-фактор большинства остатков при связывании с лигандом уменьшается (точки лежат выше прямой  $y=x$ ).

Видимо, это говорит о том, что взаимодействие с лигандом стабилизирует положение связанных с ним аминокислотных остатков.

## 2. Ссылки.

1. Ссылка на сессии PyMol: [5MV0.pse](#); [5VLV.pse](#)
2. Ссылка на colab: [тут](#)