

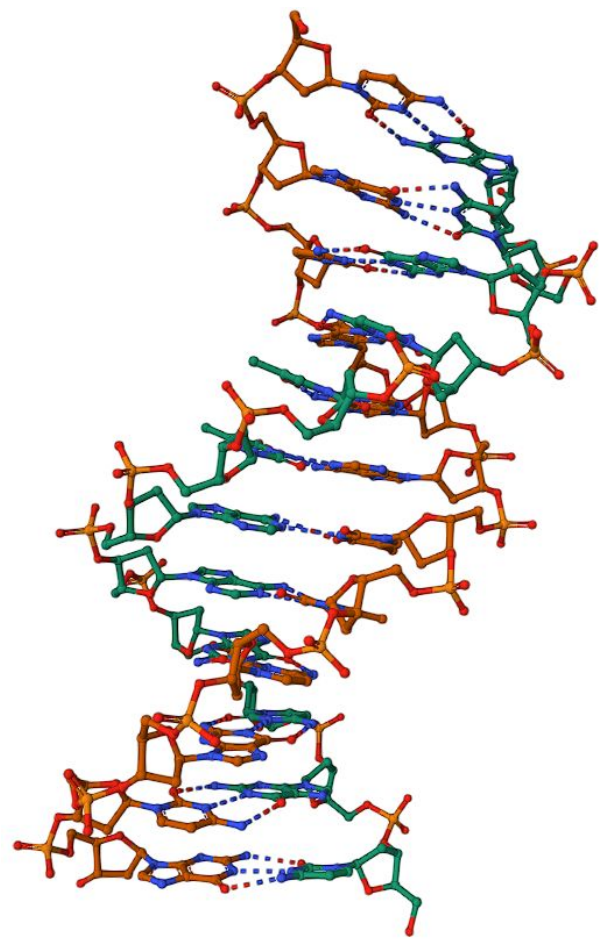
Изучение структуры ДНК

семинар 1

Структура В-формы ДНК

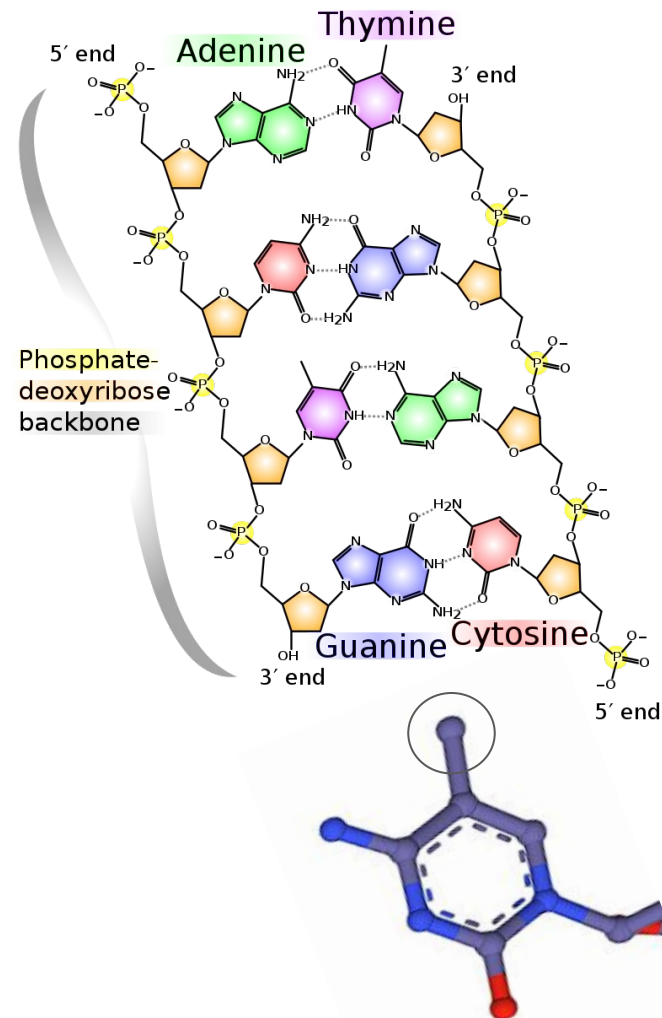
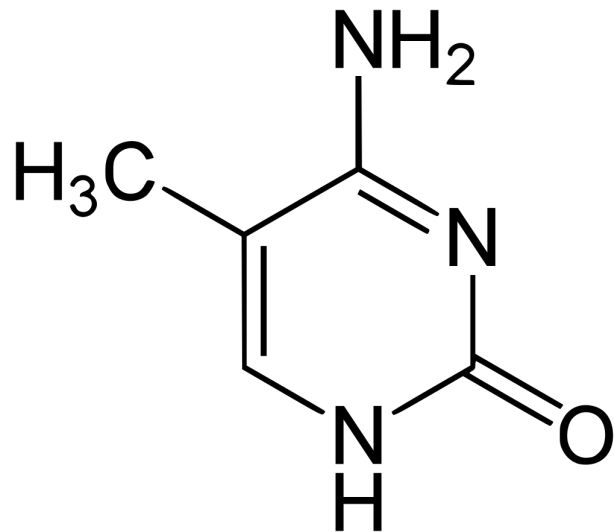
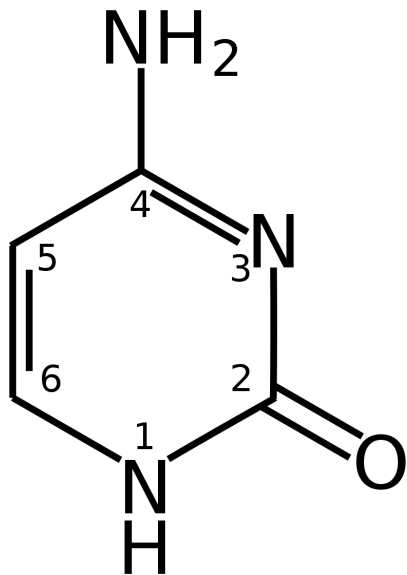
<https://www.rcsb.org/3d-view/1BNA/1>

- 3D view: Structure
- add representation (ball&stick),
- delete representation (cartoon)

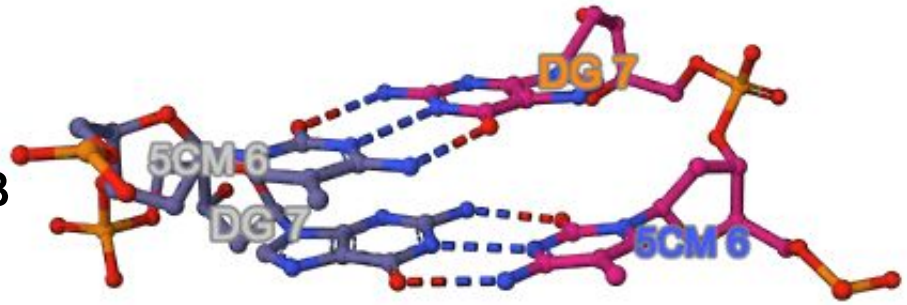


PDB ID: 1BNA

Структура ДНК с 5mC



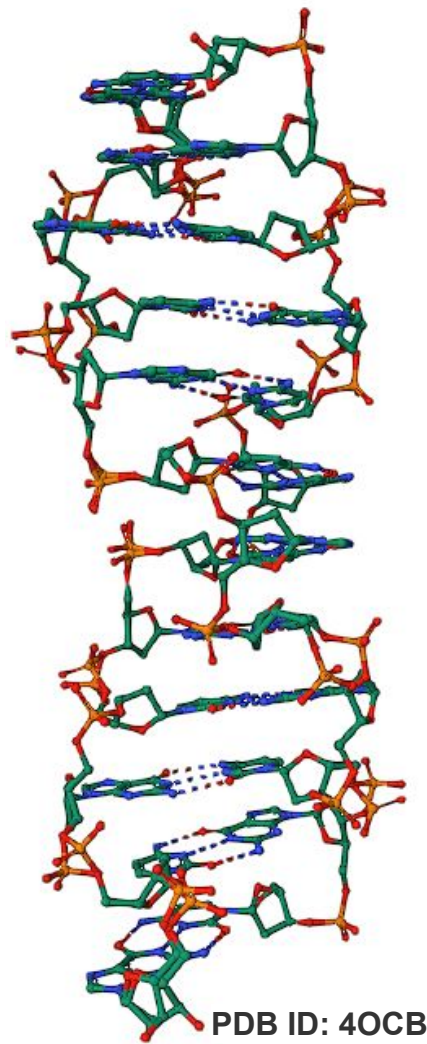
Задача: поиск метилированных островков CpG в PDB



- <https://www.rcsb.org/structure/6CNP> (Crystal structure of MBD2 complex with methylated CpG island)
- 3D view: 1D-3D view
- открыть вкладку ключ
- скрыть воду, ионы, белок
- для Nucleic сделать репрезентацию ball&stick
- открыть последовательность chain D, найти CpG островок на структуре, (см modified monomer)
- Выделить CpG на структуре, добавить label, посмотреть ориентацию метильной группы

Задача: поиск Z-ДНК в PDB

- например, структура 4OCB
- визуализировать в виде cartoon, ball&stick



PDB ID: 4OCB

Задача: Исследование геометрических параметров ДНК

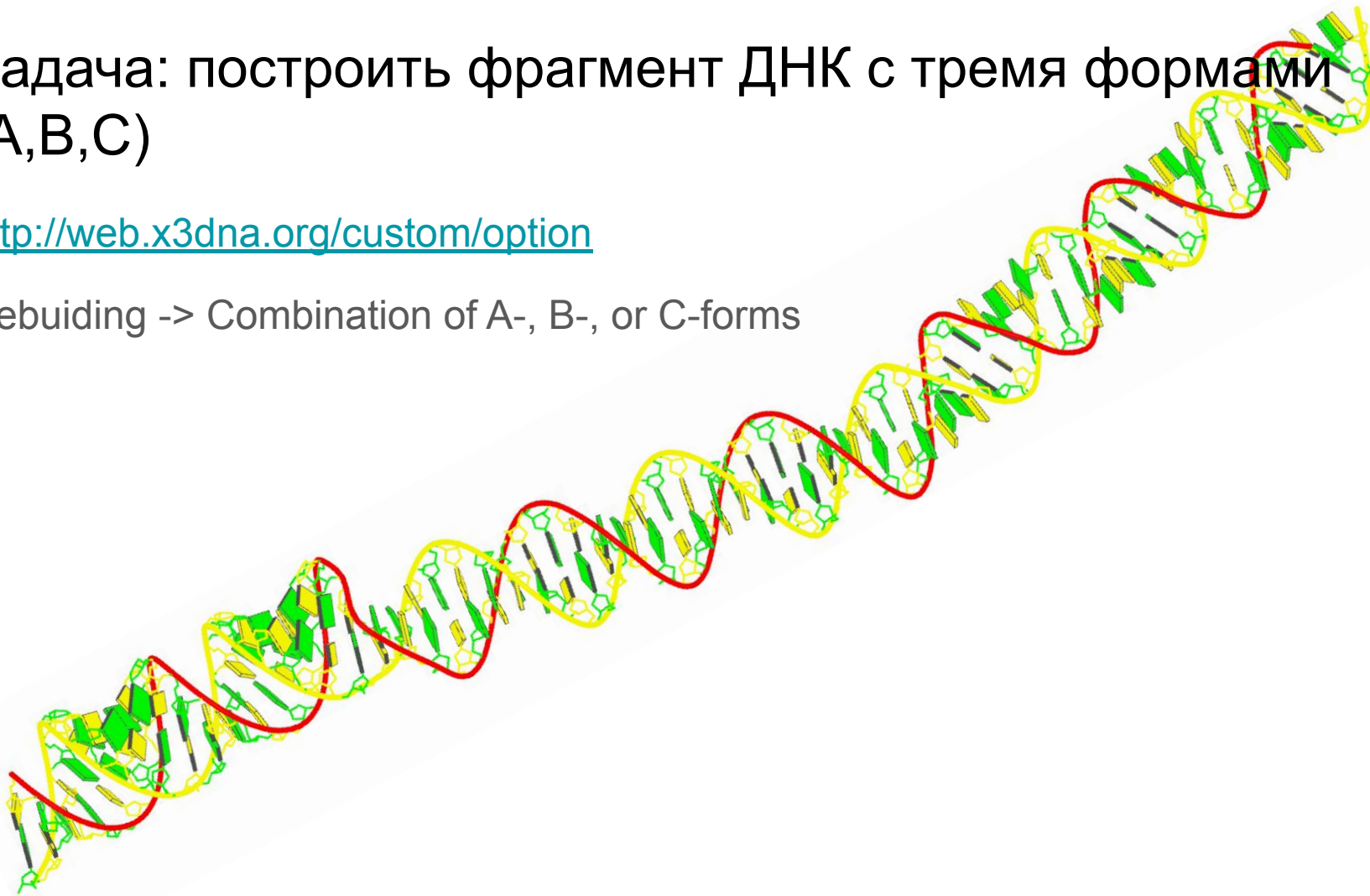
1. посчитать Local base-pair step параметры для ДНК из структур: B-DNA (1BNA), Z-DNA (4OCB)
2. <http://web.x3dna.org/analyze/parameter>
3. Analysis -> Parameter Tables -> Local base-pair step parameters

Local base step parameters									
Step ID	Step	Base1	Base2	Shift	Slide	Rise	Tilt	Roll	Twist
1	C/G	A:1:C	A:2:G	0.34	0.05	3.62	-2.7	7.62	40.55
2	G/C	A:2:G	A:3:C	0.81	0.05	3.47	2.13	-3.26	38.66
3	C/G	A:3:C	A:4:G	-0.31	0.6	2.85	12.98	5.26	24.5
4	G/A	A:4:G	A:5:A	0.82	0.39	3.38	0	2.87	42.41
5	A/A	A:5:A	A:6:A	0.46	-0.08	3.36	3.85	1.28	36.94
6	A/T	A:6:A	A:7:T	1.01	-0.61	3.22	5.73	-2.24	35.4
7	T/T	A:7:T	A:8:T	0.19	-0.15	3.2	7.28	0.39	31.07
8	T/C	A:8:T	A:9:C	0.5	-0.17	3.37	2.02	-1.78	38.2
9	C/G	A:9:C	A:10:G	0.77	0.7	3.4	5.23	8.6	29.49
10	G/C	A:10:G	A:11:C	-0.87	0.48	3.96	-2.69	-18.65	39.11

Задача: построить фрагмент ДНК с тремя формами (A,B,C)

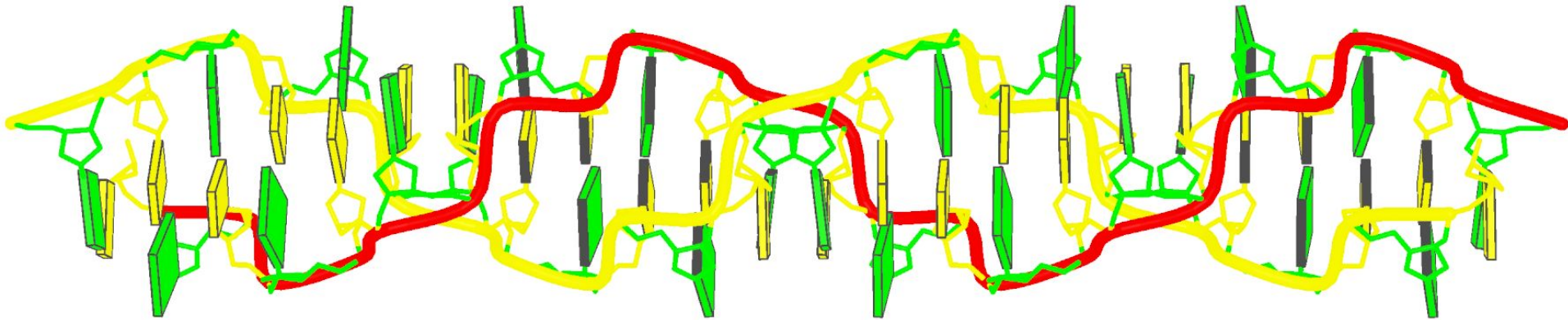
<http://web.x3dna.org/custom/option>

Rebuiding -> Combination of A-, B-, or C-forms



Задача: построить фибриллу Z-DNA

- <http://web.x3dna.org/index.php/fibermodel>



Задача: генерация комплекса ДНК-белок на заданной последовательности и форме ДНК

1. выбрать в PDB структуру референс (например, 3F27)
2. 3DNA -> Composite ->



