

Исследование структуры ДНК

семинар 1

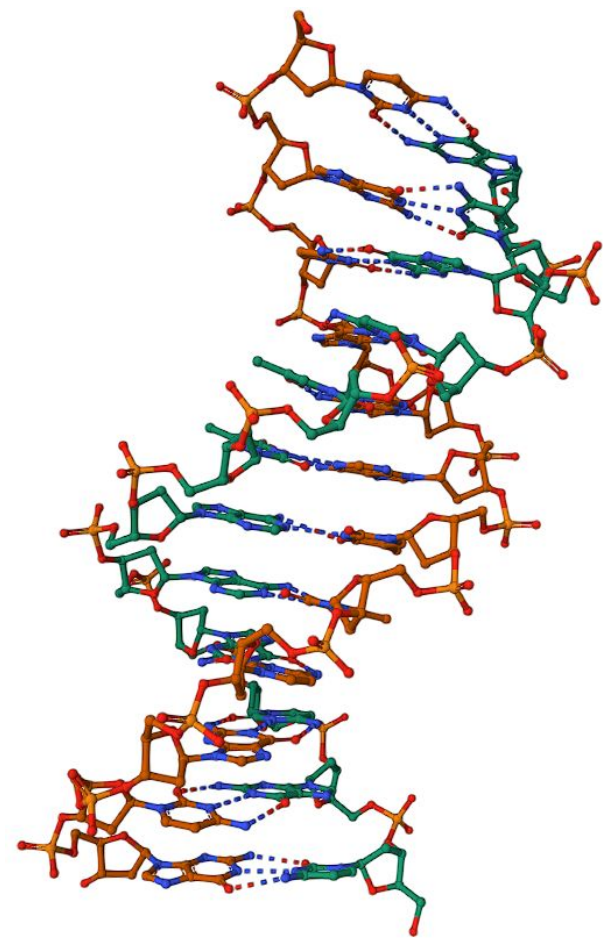
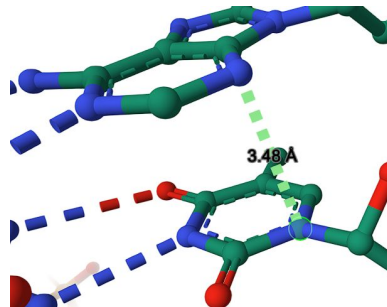
Структура В-формы ДНК

<https://www.rcsb.org/structure/1bna>

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

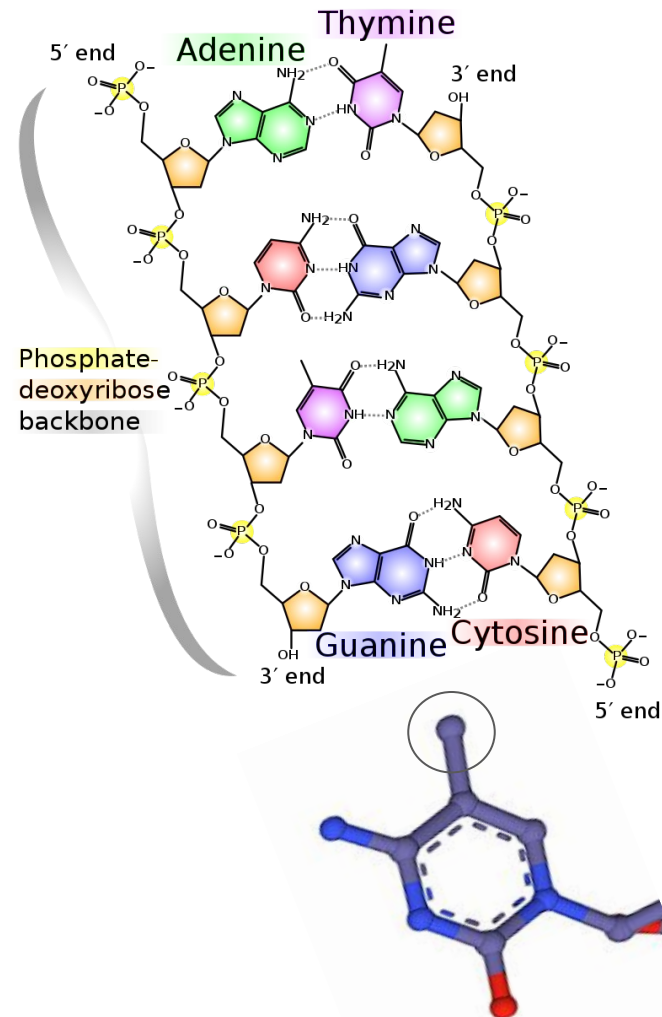
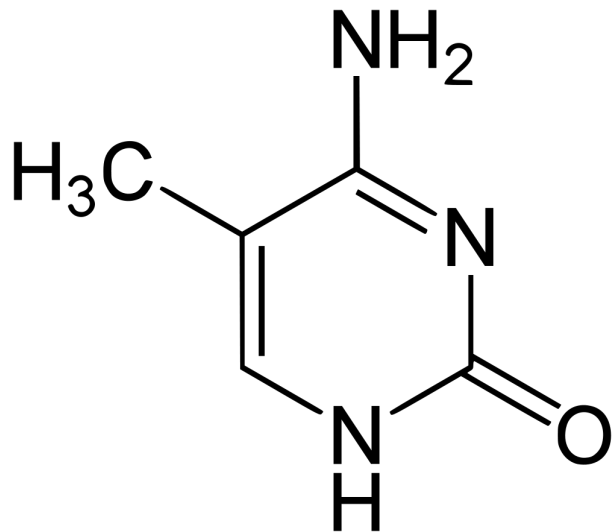
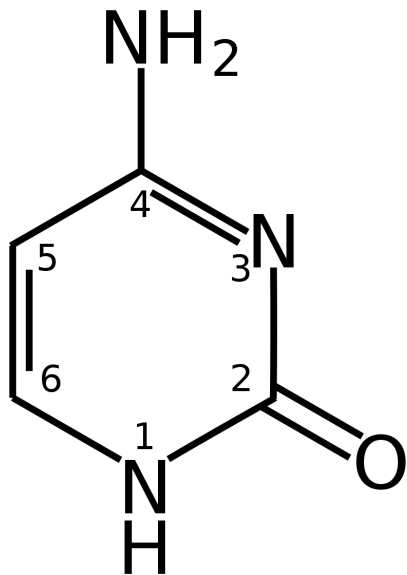
- Explore in 3D: Structure
- add representation (ball&stick),
- delete representation (cartoon)
- hide components (water)

2) Измерить расстояние между двумя основаниями (выбрать picking level - atom)

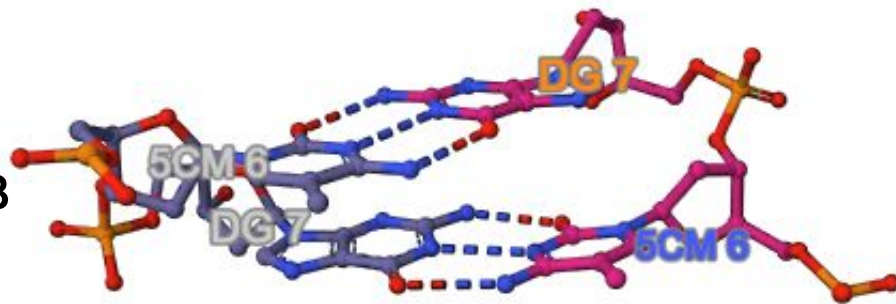


PDB ID: 1BNA

Структура ДНК с 5mC



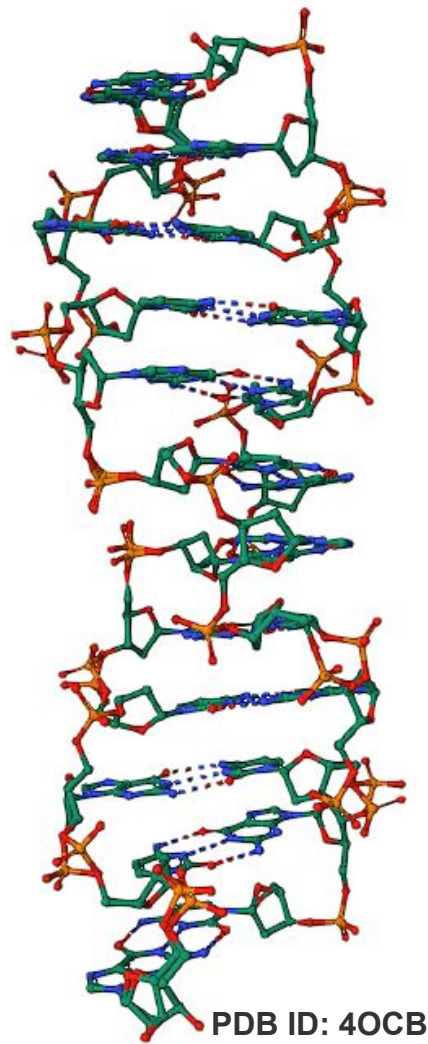
Задача: поиск метилированных островков CpG в PDB



- <https://www.rcsb.org/structure/6CNP> (Crystal structure of MBD2 complex with methylated CpG island)
- Explore in 3D: Structure
- скрыть воду, ионы, белок (можно добавить 2 компонента Nucleic, Protein)
- 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



Web 3DNA 2.0 for the analysis, visualization, and modeling of 3D nucleic acid structures

[Analysis](#)[Visualization](#)[Rebuilding](#) • [Composite](#) • [Fiber](#) • [Mutation](#)[Tutorials](#) | [Q&As](#) | [Links](#)

Type in a PDB/NDB ID or Upload a PDB file: ?

Type in a PDB/NDB ID ?

[Analyze](#)

PDB Search

—OR—

Upload a PDB-formatted file [e.g., example.pdb] ?

Файл не выбран

[Analyze](#)

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

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)

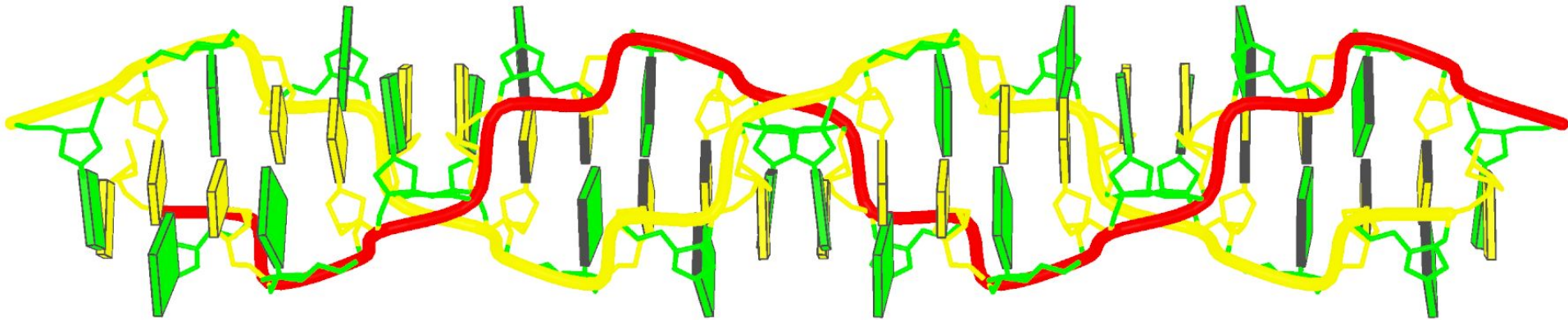
<http://web.x3dna.org/index.php/rebuild>

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



Задача: построить фибриллу Z-DNA

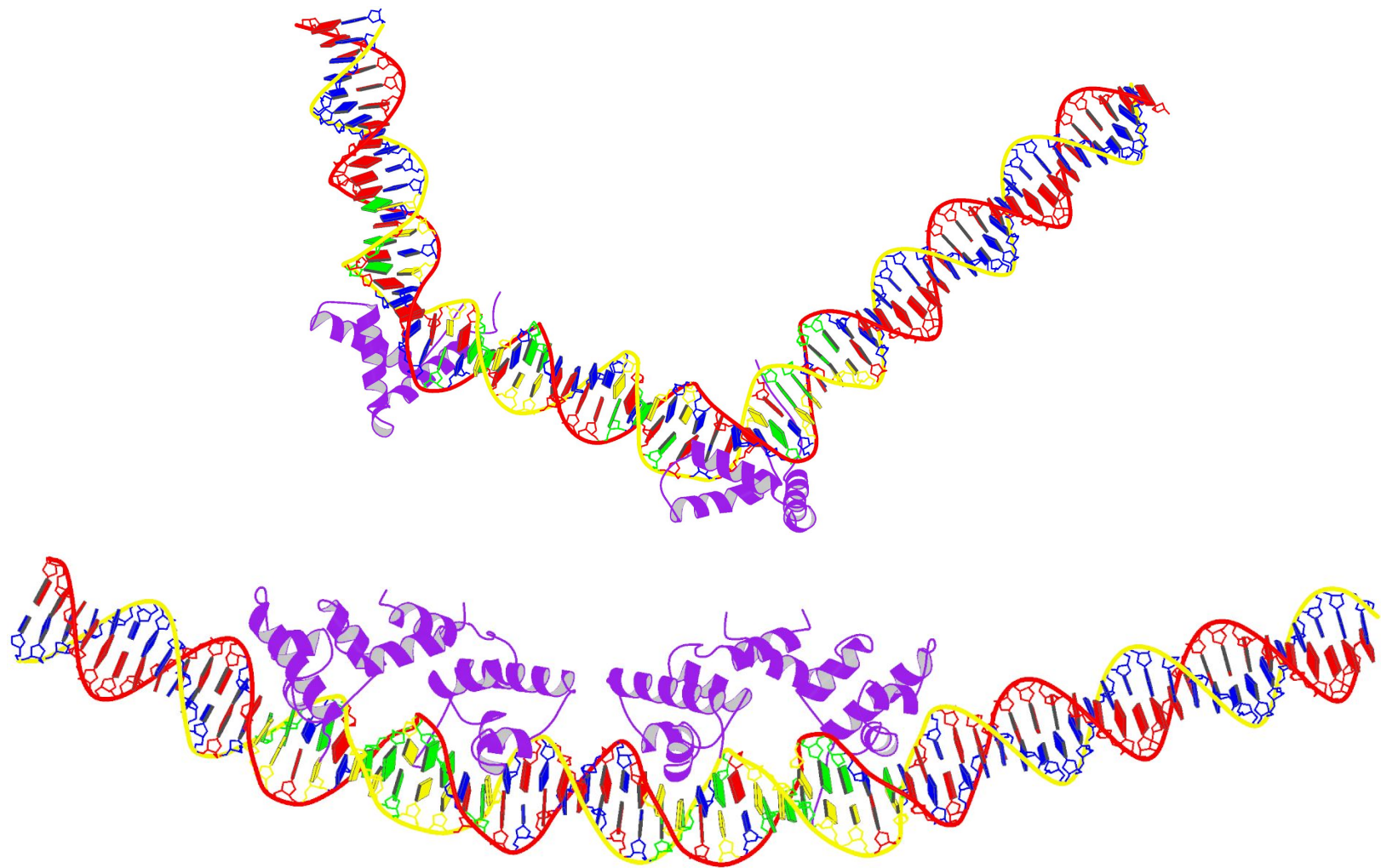
- <http://web.x3dna.org/index.php/fibermodel>



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

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






Знакомство с HistoneDB 2.0

<https://histonedb.bioeng.ru/>

HistoneDB 2.0

Browse

Analyze Your Sequence

 Basket **5**

Human Histones

Help

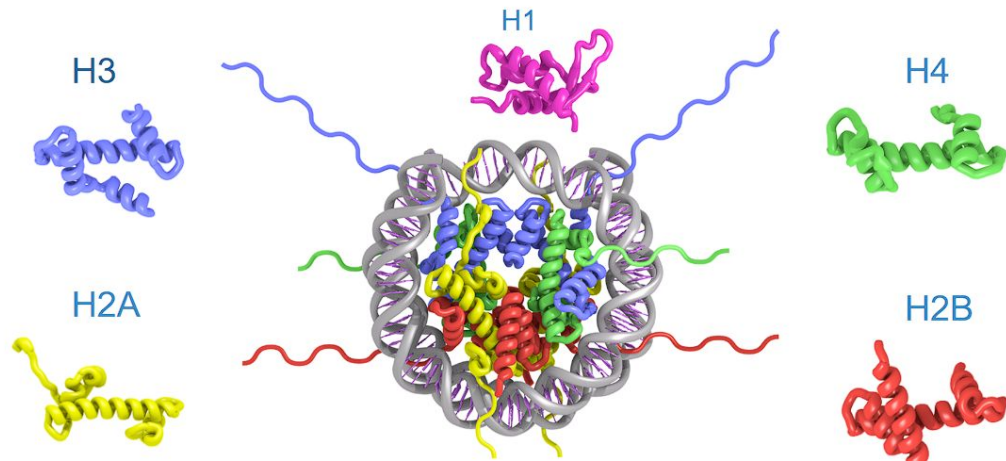
Search (H2A.Z.2.s1)

Search

Advanced

HistoneDB 2.0 – with variants

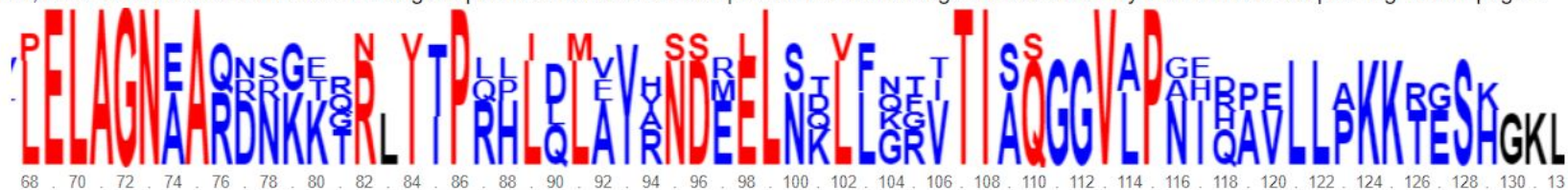
This histone database can be used to explore the diversity of histone proteins and their sequence variants in many organisms. The resource was established to better understand how sequence variation may affect functional and structural features of nucleosomes. To get started, select a histone type to explore its variants.



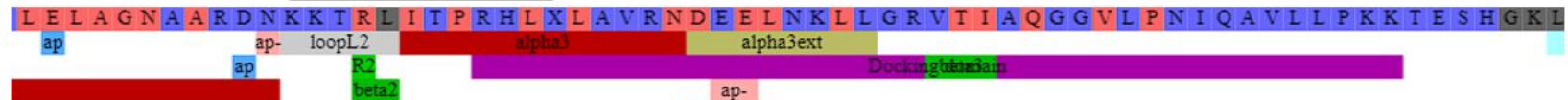
Задача: сделать множественное выравнивание гистонов H2A

1. Выбрать из Curated sequence нужные гистоновые варианты (например, канонический, macro, short H2A.B, H2A.Z) для человека и мыши - положить последовательности в корзину
2. Сделать MSA

Keys: red - 80% identical, blue - 50% identical columns. X-ambiguous positions in consensus sequence. For feature legends see summary tabs of the corresponding variant pages.



Consensus



NP...1|homo..|ca_H2A
NP...1|mus..|ca_H2A
XP...1|homo..|macroH2A
NP...1|mus..|H2A.B
NP...1|homo..|H2A.B



Знакомство с NuclDB

<https://nucldb.intbio.org/>



Browse Statistics Help Collection: 3

Search (e.g. DOT1L)

Search

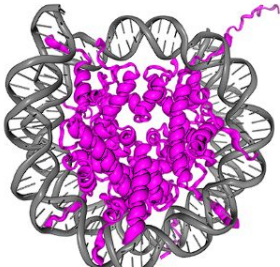
Advanced

NucleosomeDB - a database of nucleosome structures

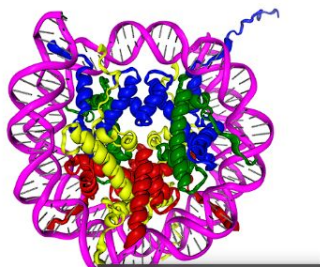
The database allows the exploration of nucleosome structures' diversity and searches them by histone and DNA sequence types, interaction partners, and multi-nucleosomal organization. NucleosomeDB provides tools for a comparative analysis of histone and DNA geometry and their contacts in an aligned reference frame. To get started explore nucleosome collections below.

Last update 01.02.2023

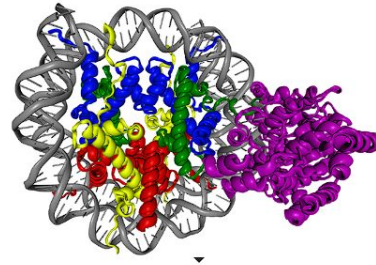
Core Histone Variants



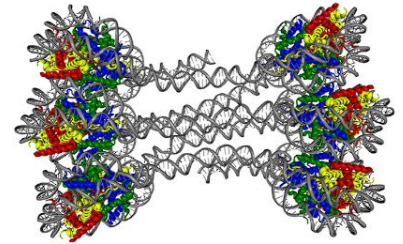
Dna Sequence Variants



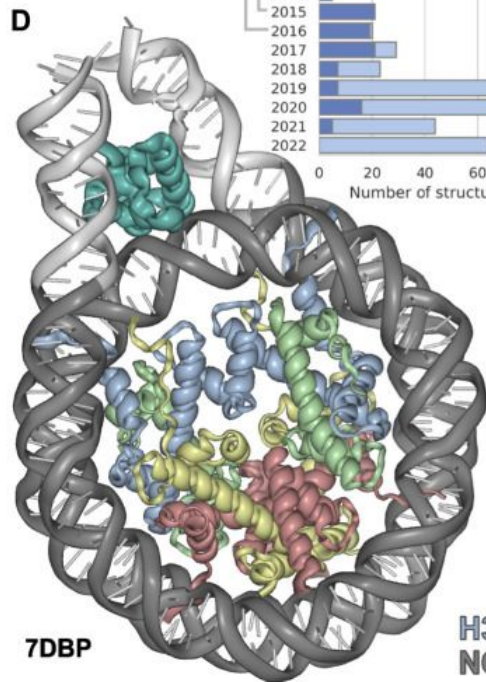
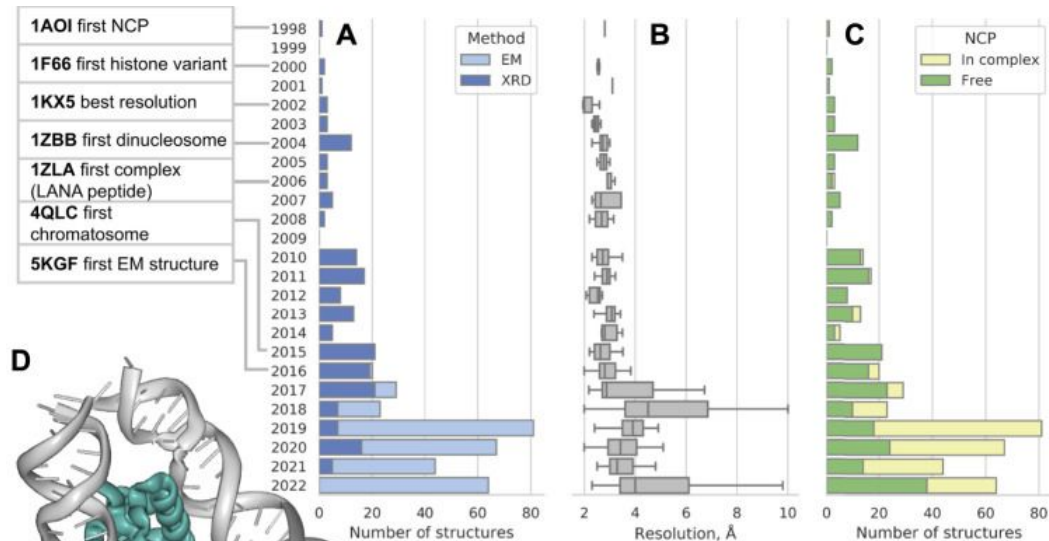
Nucleosome Complexes



Supranucleosomal Complexes



NucIDB



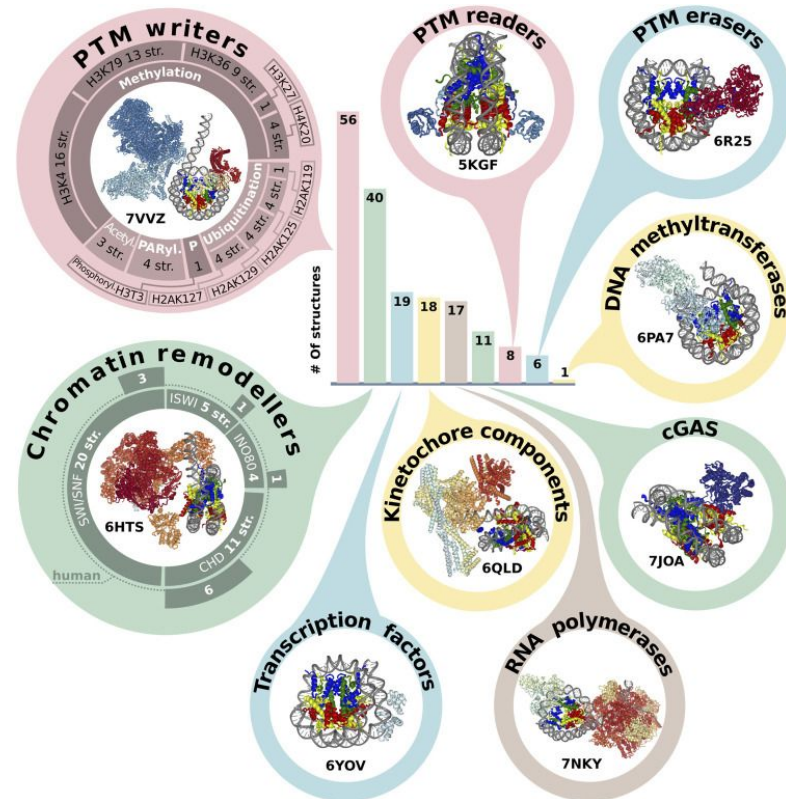
E

H3		H2B	
canonical	386	canonical	436
H3.3	31	H2B.1	5
cenH3	27		
TS_H3.4	1		
H3.5	1		
H3.Y	1		
H3.6	1		

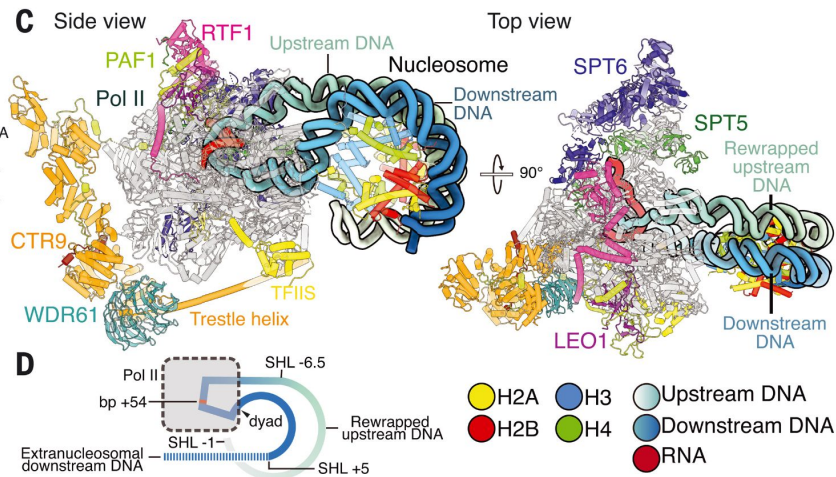
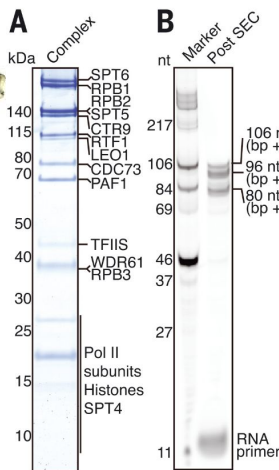
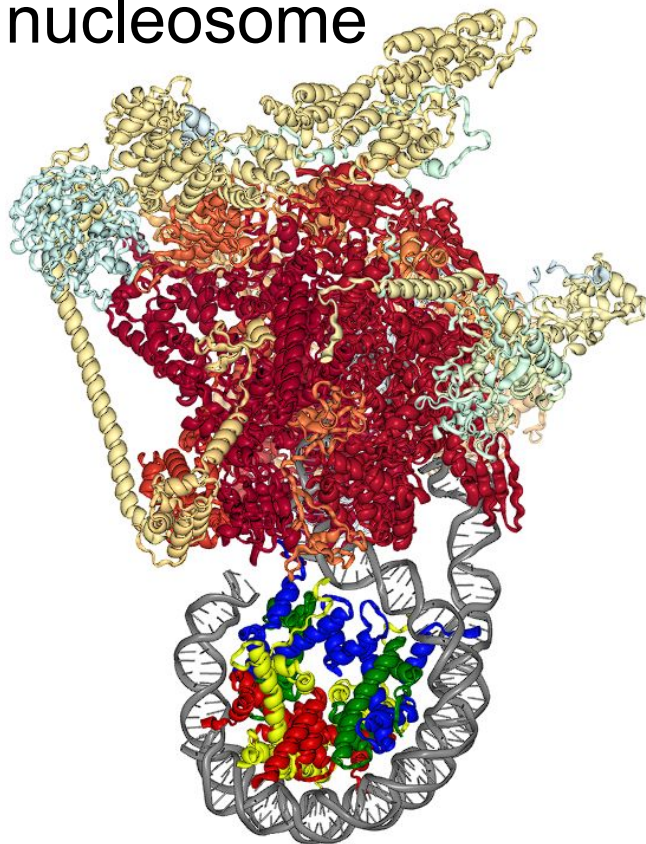
Linker histone	
Human H1.4	20
Human H1.0	7
H5	2
Human H1.10	2
H1.8	1
H1.0-B	1

H2A	
canonical	407
H2A.X	19
H2A.Z	10
H2A.1	4
macroH2A	2
H2A.B	2

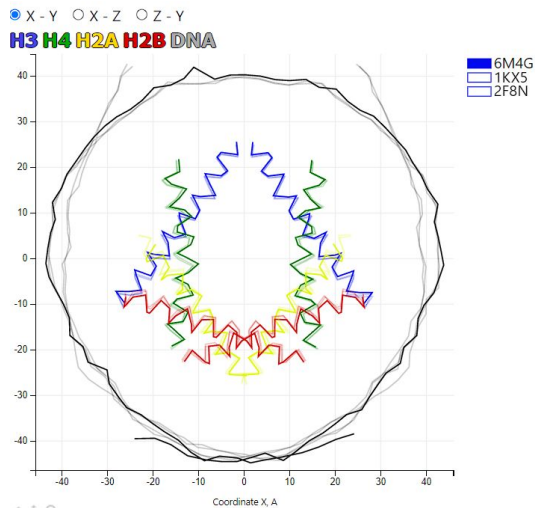
Positioning DNA sequence	
Widom 601 based	246
α -satellite based	166
telomeric	10
MMTV	3
other	16



PoI II-DSIF-SPT6-PAF1c-TFIIS complex with rewrapped nucleosome



Задача: сравнение структур нуклеосом с canonical H2A, H2A.B, macroH2A, H2A.Z



1. менее стабильные нуклеосомы с H2A.B
2. другие заряды в H2A.B в acidic patch
3. Макро-домен H2A не разрешен, так что
разница структур с каноническим не велика

Comparative analysis of selected structures



Proximal

Distal

