

Кузин А.П., Уржумцев А.Г. (1983)

Уточнение кристаллической структуры
актиноксантина
при разрешении 1,8А МНК в обратном пространстве

VI Всесоюзный симпозиум по химии белков и
пептидов,
Рига, ноябрь 1983,
Тезисы докладов, 186.

Тез. докл. "VI Всесоюзный симпозиум по химии белков и нуклеиновых кислот", г. Рига, ноябрь 1983

УТОЧНЕНИЕ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ АКТИНОКСАНТИНА
ПРИ РАЗРЕШЕНИИ 1,8 Å МНК В ОБРАТНОМ ПРОСТРАНСТВЕ

А.П.Кузин, А.Г.Уржумцев

Институт биоорганической химии им. М.М.Шемякина
АН СССР, Москва
Научно-исследовательский вычислительный центр
АН СССР, Пушкино

Реперные координаты неводородных атомов противоопухолевого белка актиноксантина определили с модели, построенной с помощью оптического компаратора Ричардса по картам электронной плотности (КЭП), рассчитанных по изомерным фазам с разрешением 2,5 Å. С помощью программы построения регуляризованной модели получили полный набор неводородных атомов. Набор экспериментальных дифрактометрических данных получили с двух кристаллов: с 1 кристалла в зоне разрешения до 2,0 Å, со 2 - от 2,14 Å до 1,8 Å. Приведение экспериментально измеренных моделей структурных факторов к абсолютной шкале, а также определение среднего значения температурного фактора атомов, равного $14,5 \text{ Å}^2$, приписанного первоначально атомам исходной модели, проводилось по методу Вильсона. R-фактор сгенерированной модели (исходной), равный 0,53, после 7 циклов предварительного уточнения в прямом пространстве по методу Даймонда понизился до 0,41 (2 Å-ные данные). Дальнейшее уточнение проводилось МНК в обратном пространстве по методу Агарвала. Было выполнено 18 циклов уточнения координат и 12 циклов уточнения изотропных температурных факторов атомов, постепенно расширяя зону разрешения с 10 Å - 2,5 Å до 10 Å - 2,0 Å. При этом фактор понизился до 0,22. Затем оба набора данных с разных кристаллов объединили и продолжили уточнение в зоне до 1,8 Å. Соответствующий R-фактор - 0,23. На окончательном этапе уточнения было включено несколько десятков предполагаемых молекул воды, что уменьшило R - фактор до 0,21.

Визуальное наблюдение участков КЭП со вписанными боковыми группами некоторых аминокислотных остатков, а также сравнение со стандартными значениями геометрии остатков показывает, что резкие противоречия в стереохимии отсутствуют.