На ресурсе Pdb.org найти структуру комплекса белок - лиганд, определенную методом рентгеноструктурного анализа (качество разрешения не более 3 ангстрем). Найти область взаимодействия лиганда с аминокислотными остатками и графически изобразить характер связывания. ( просмотр - NGL)

Пример выполнения задания. Комплекс 4L1A : Crystallographic study of multi-drug resistant HIV-1 protease Lopinavir complex: mechanism of drug recognition and resistance

Hydrogen Bonds

Halogen Bonds

Hydrophobic Contacts

Pi Interactions (orange, green)

Metal Interactions





Показаны водородные связи между амидным водородом в D29 (аспарагиновая кислота) и кислородом О1.