
• 封面故事 •

OASIS 是用于蛋白质结构分析的直接法衍射相位推演程序. 该程序以中国科学院物理研究所提出的方法为基础. 物理研究所还提出了由 OASIS 和国外的电子密度修饰程序 DM、模型构建程序 ARP/wARP 以及模型精修程序 REFMAC 联合执行的 SAD 或者 MR 的双空间迭代算法. SAD 和 MR 是蛋白质结构分析中广泛使用的两种方法. 前者用于无结构已知的同源类似物的情况; 后者用于有结构已知的同源类似物的情况. OASIS 可以显著地提高这两种方法的效能. TTHA1012 是用 OASIS 帮助解出的一例困难的蛋白质结构(晶体衍射数据由日本名古屋大学渡边信久(Nobuhisa Watanabe)教授提供). 这一实例要求从两个硫原子的异常散射效应出发, 解出含有 213 个氨基酸残基的蛋白质结构. 左图是经过 21 轮直接法 SAD 迭代所得的结构模型, 它包含占总数 70% 的 149 个氨基酸残基. 右图是 11 轮直接法 SAD 迭代继以 10 轮直接法 MR 迭代所得的结果, 它包含占总数 75% 的 159 个氨基酸残基. 这两个由计算机自动构建的模型, 后者更好. 但两者都不难通过手工的扩充和精修获得最终的结构.

(中国科学院物理研究所 晶体结构分析方法研究组)