

Методы моделирования пространственной структуры протеинов

**Посыпкин М.А.
mposypkin@frccsc.ru**

Организационные вопросы

Назначение курса

Курс «Методы моделирования пространственной структуры протеинов» посвящен двум основным задачам, имеющим важнейшее значение для понимания биологических процессов в организме человека и разработке лекарств. Первая задача, т.н. «фолдинг» заключается в том, что по набору входящих в белок аминокислот необходимо восстановить его пространственную структуру, т.е. координаты составляющих атомов. Решение данной задачи важно, т.к. именно пространственная структура во-многом определяет функции протеина.

Вторая проблема, рассматриваемая в курсе – это определение пространственной конфигурации комплекса, состоящего из нескольких (как правило, двух) белковых молекул. Данная задача, называемая «докинг», важна для моделирования взаимодействия белков и, в частности, лекарственных препаратов и целевых болезнетворных молекул.

В курсе рассматриваются базовые понятия структурной биологии и методы решения перечисленных проблем. В частности, существенное внимание уделяется методам, основанным на минимизации энергии молекулы белка и методам машинного обучения, применяемым для предсказания его пространственной структуры.

Содержание курса

- Базовые понятия о химических связях, функция и синтезе белков.
- Понятие аминокислоты, образование пептидной связи. Полипептиды. Конформация белка, гидрофобность и гидрофильность.
- Геометрия пептидной связи, торсионные углы основного каркаса. Карты Рамачандрана.
- Вторичная структура протеинов: альфа-спирали, бета-листы.
- Матрица контактов. Матрица расстояний. Алгоритм построения матрицы контактов.

Содержание курса

- Современные инструменты для предсказания третичной структуры белка.
- AlphaFold.
- Боковые цепочки (радикалы) белка, их влияние на свойства и форму белка. Двугранные углы радикалов. Зависимость, характерные особенности. Понятие ротамера. Библиотеки ротамеров.

Содержание курса

- Оценка предсказания белковой геометрии.
- Белковые потенциалы. Плюсы и минусы, структура. Статистический потенциал.
- Крупноблочные модели белковой геометрии. Плюсы и минусы, построение.
- Белковый докинг. Главные понятия, постановка задачи.
- Современные методы моделирования докинга. Autodock. Жесткий докинг.

Формула оценки

Накопленная оценка (0–10): $O_{\text{накоп}} = \frac{\sum_{i=1}^4 ДЗ_i + КР_1}{5}$

Оценка за экзамен (0–10): $O_{\text{экз}}$

Оценка за курс (0-10): $O_{\text{итог}} = O_{\text{накоп}} \cdot 0,5 + O_{\text{экз}} \cdot 0,5$

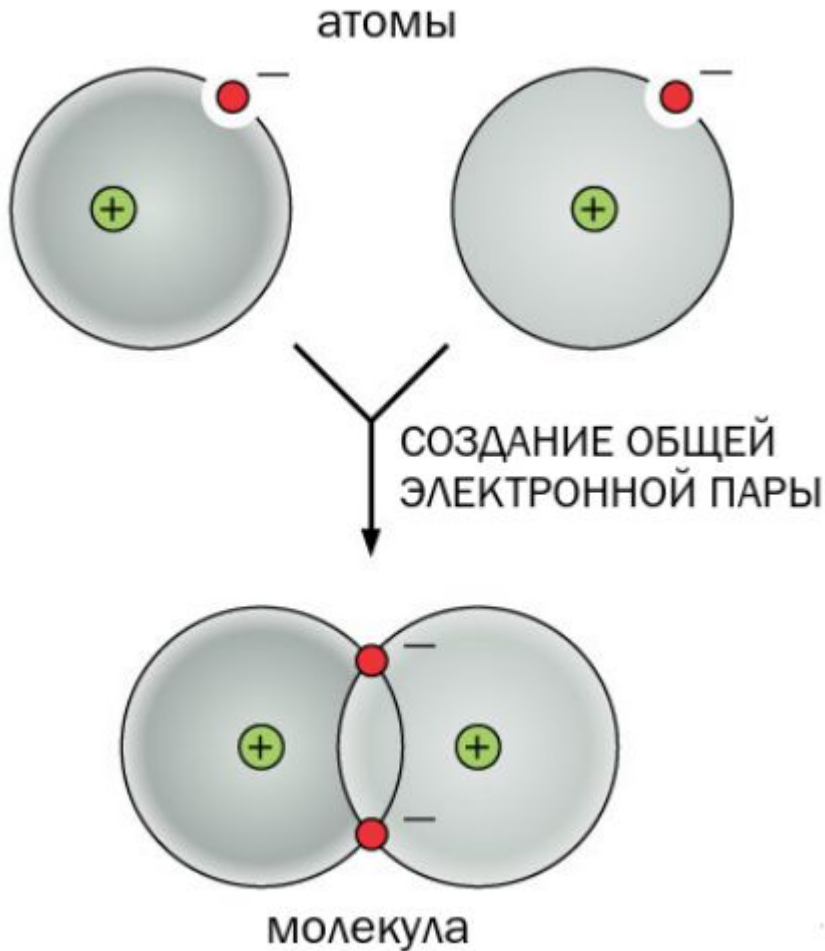
Если накопленная оценка (после округления) составляет 8 баллов или выше, студенту может быть предложена экзаменационная оценка, равная округленной накопленной («автомат»). Если студент согласен с такой оценкой за экзамен, он освобождается от устного ответа на экзамене, и за экзамен ставится оценка, равная накопленной.

Введение и основные понятия

Проблема фолдинга

- Белок задается последовательностью входящих в него аминокислот.
- Функция белка определяется не только химическим составом, но и его трехмерной структурой.
- В организме белки существуют в нативном свернутом состоянии. После синтеза белок сворачивается под действием различных сил межатомного взаимодействия.
- Задача *фолдинга* заключается в том, чтобы по последовательности аминокислот определить трехмерную конфигурацию белка.
- Задача является вычислительно сложной, и на данном этапе решена достаточно плохо.

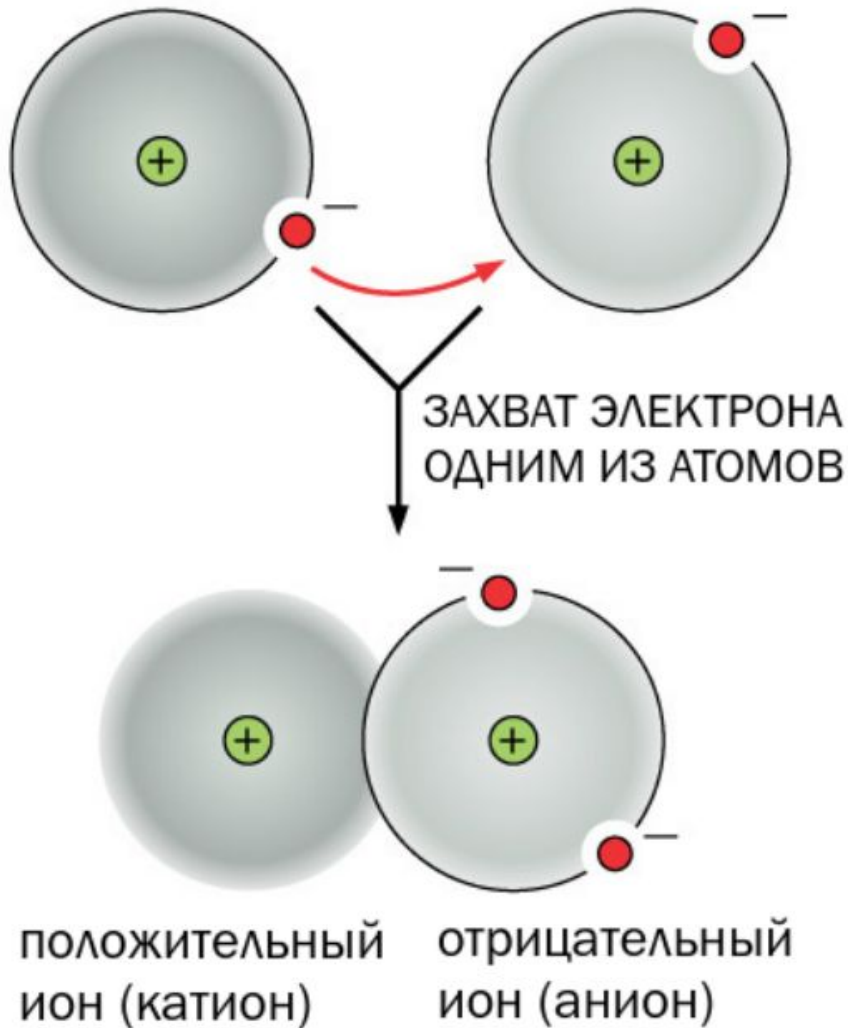
Ковалентная связь



Ковалентная связь, образуемая общей электронной парой (по одному электрону от каждого атома). Электроны этой пары принадлежат обоим атомам сразу.

Кроме одинарных ковалентные связи бывают двойными или тройными.

Ионная связь



Ионная связь — сильная химическая связь, возникающая в результате электростатического притяжения катионов и анионов.

Положительный ион (катион) и отрицательный ион (анион) притягиваются друг к другу.

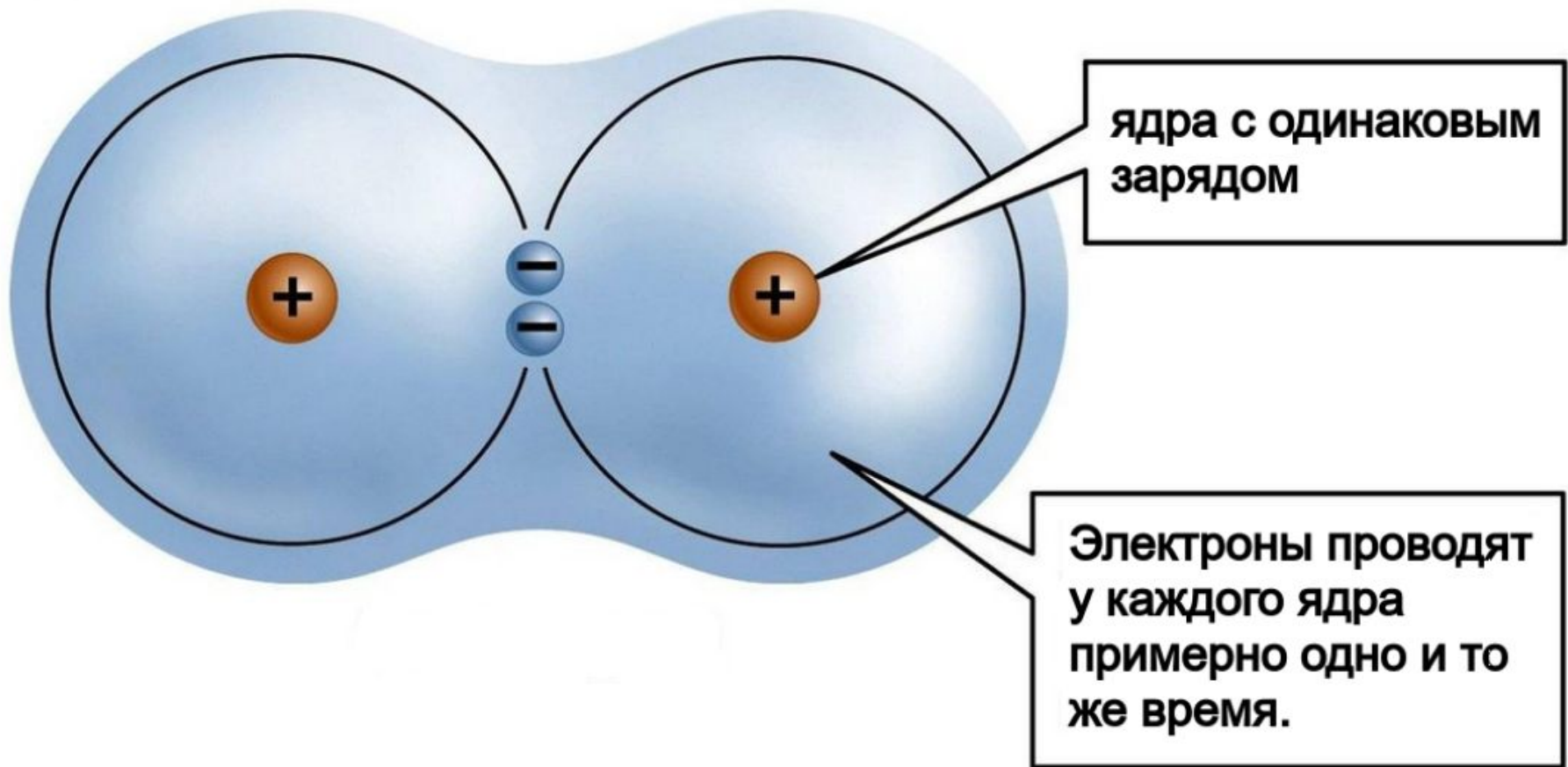
Полярные и неполярные ковалентные связи

Полярность связи обусловлена неравномерным распределением электронной плотности вследствие различий в электроотрицательностях атомов.

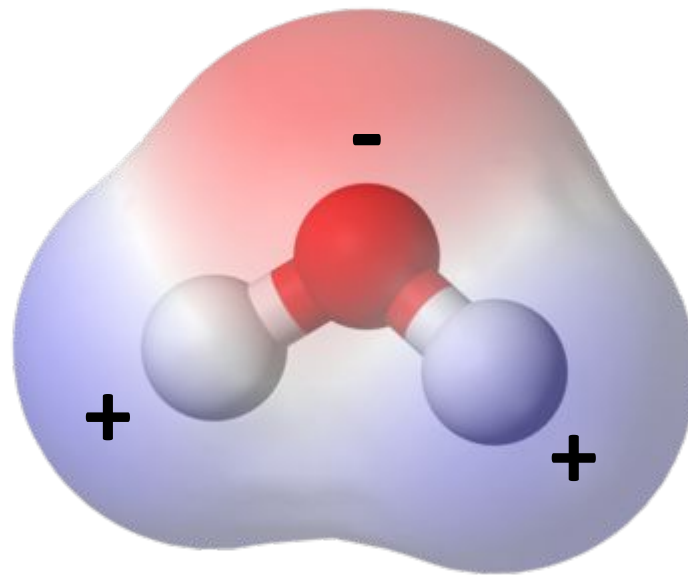
Неполярные — двухатомная молекула состоит из одинаковых атомов (H_2 , Cl_2 , N_2) и электронные облака каждого атома распределяются симметрично относительно этих атомов.

Полярные — двухатомная молекула состоит из атомов разных химических элементов, и общее электронное облако смещается в сторону одного из атомов, образуя тем самым асимметрию распределения электрического заряда в молекуле, порождая дипольный момент молекулы.

Пример неполярной связи - водород



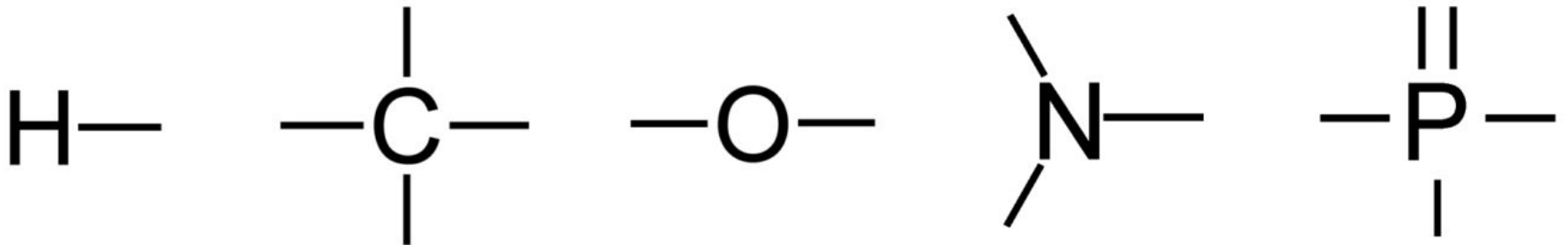
Пример полярных связей - вода



Валентности основных элементов

Валентность - число ковалентных связей, которые может образовать данный атом.

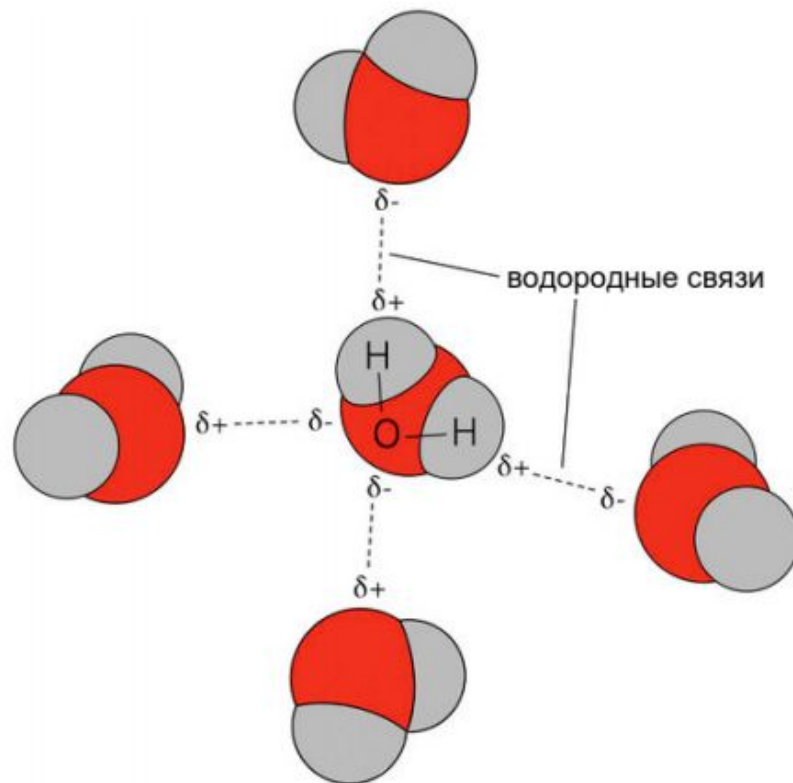
водород - 1, углерод - 4,
кислород - 2, азот - 3, фосфор - 5



Водородная связь

Водородная связь — форма ассоциации между электроотрицательным атомом и атомом водорода Н, связанным ковалентно с другим электроотрицательным атомом.

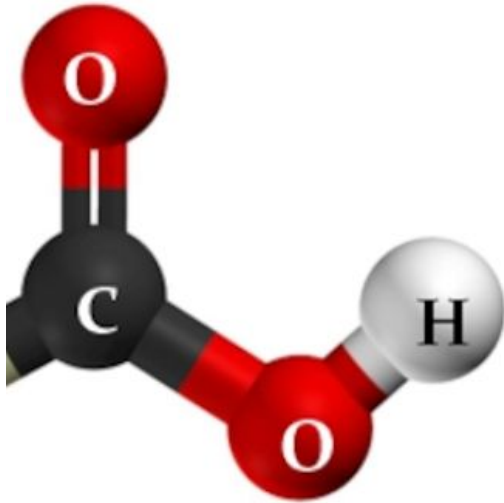
В качестве электроотрицательных атомов могут выступать N, O или F. Водородные связи могут быть межмолекулярными или внутримолекулярными.



Растворение в воде

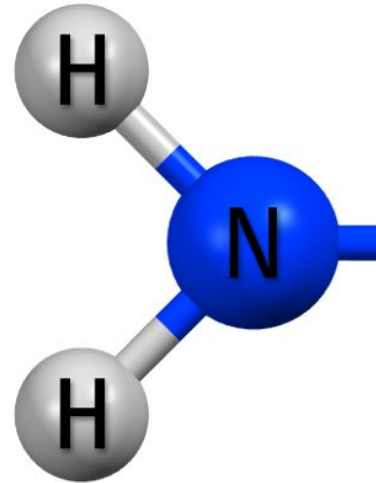
- В природе белки существуют в растворе (приблизительно можно считать водным раствором).
- Любые заряженные частицы в водном растворе гидратируются, то есть окружаются молекулами воды.
- Полярные молекулы хорошо взаимодействуют с водой, образуя с ней водородные связи и подвергаясь гидратации. Такие вещества хорошо растворяются в воде и называются **гидрофильными**.
- Неполярные молекулы взаимодействуют с водой гораздо слабее, чем друг с другом. Такие вещества плохо растворяются в воде и называются **гидрофобными**.

Карбоксильная и амино- группы



Карбоксильная группа:
функциональная
одновалентная группа
COOH, входящая в состав
карбоновых кислот.

Аминогруппа:
функциональная
химическая одновалентная
группа NH_2 , содержащий
один атом азота и два
атома водорода.

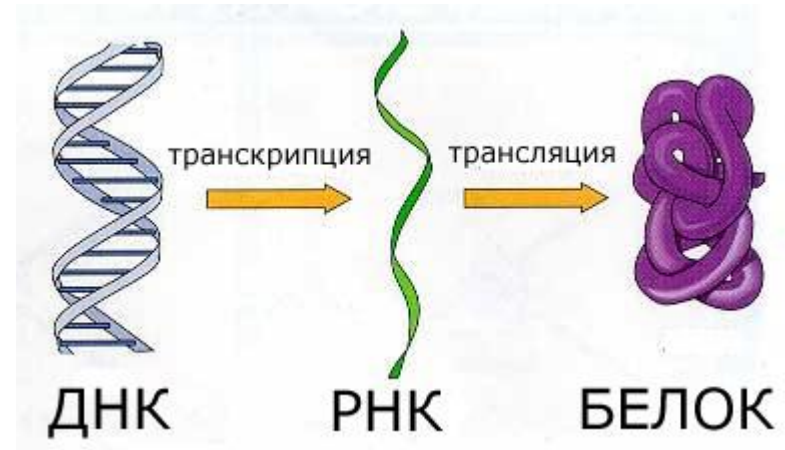


Белок

- ✓ Белок представляет собой последовательность аминокислот, соединенных пептидными связями.
- ✓ В белки входят 20 основных аминокислот.
- ✓ Функции белка определяются не только последовательностью входящих в него аминокислот, но и пространственной структурой.
- ✓ Процесс принятия белком своей пространственной структуры называется **фолдингом**.
- ✓ Задача моделирования фолдинга состоит в определении трехмерной структуры белка по последовательности его аминокислот.

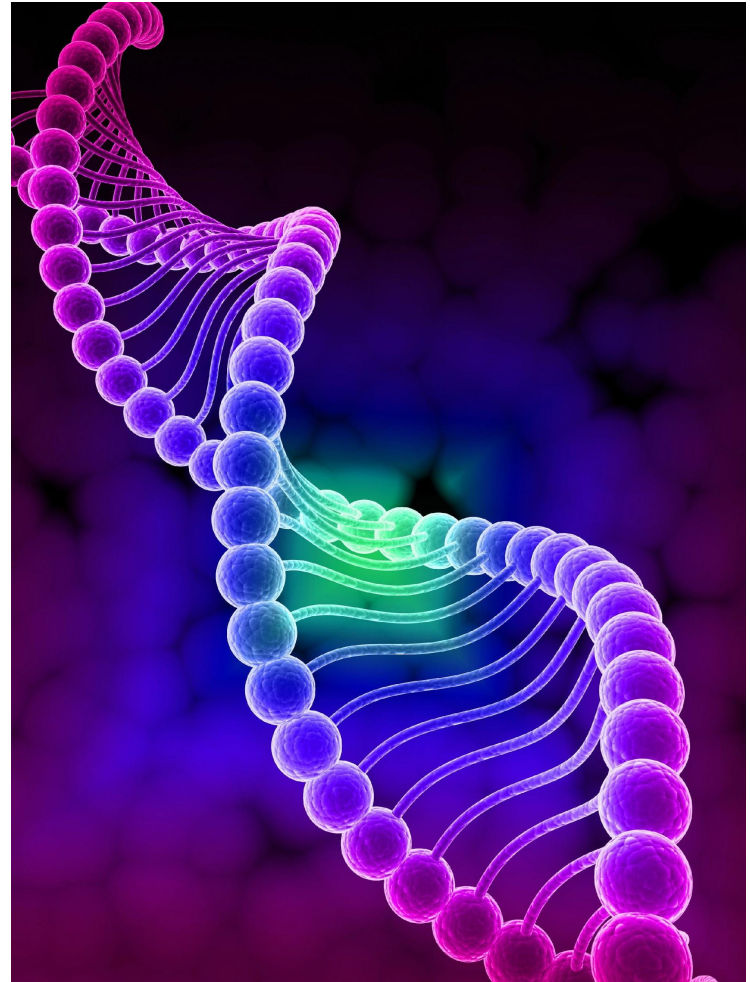
Синтез белка

- Биосинтез белка — это один из видов пластического обмена, в ходе которого наследственная информация, закодированная в генах ДНК, реализуется в определённую последовательность аминокислот в белковых молекулах.
- Процесс синтеза белка состоит из двух фаз: транскрипции и трансляции

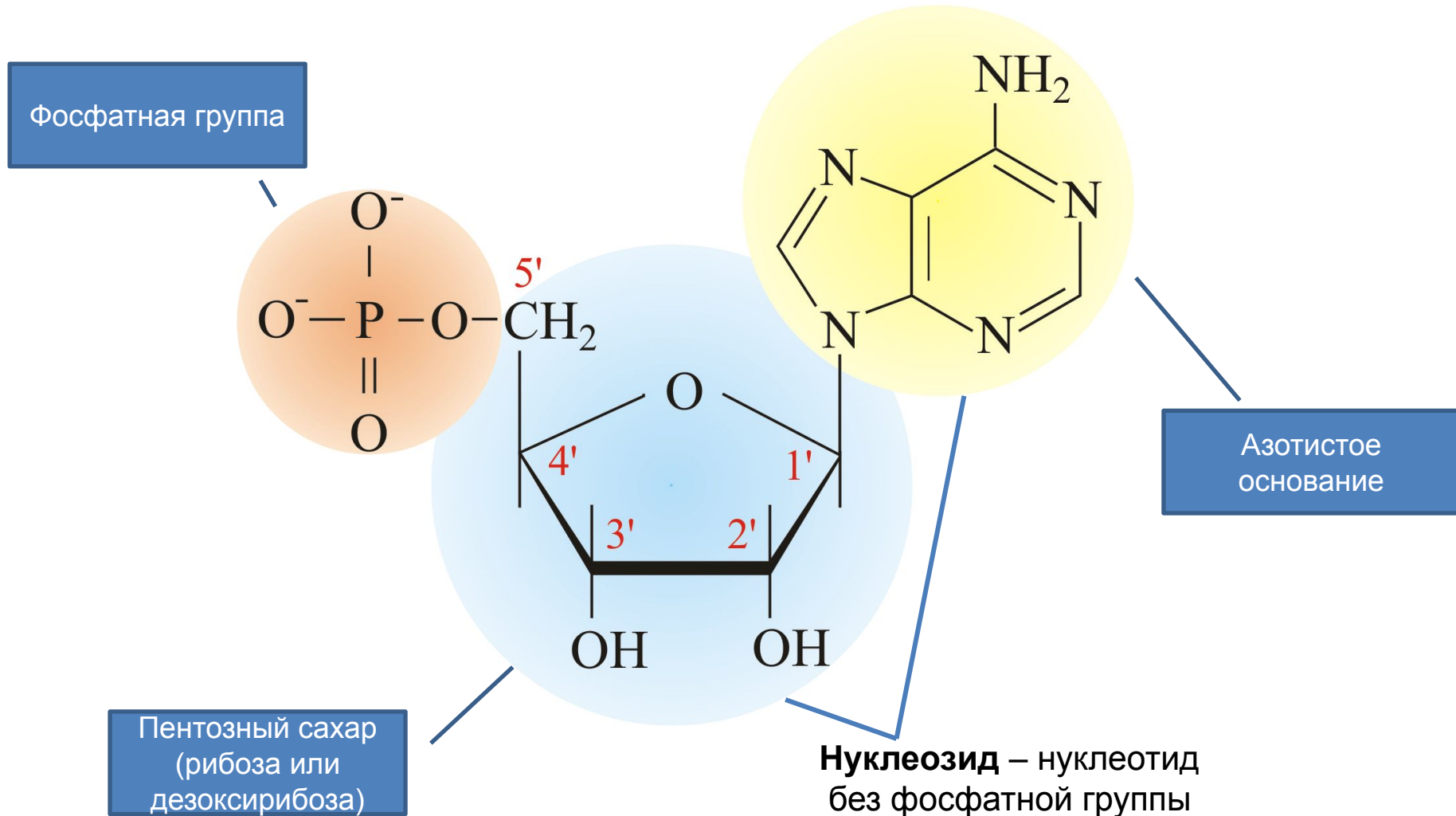


ДНК

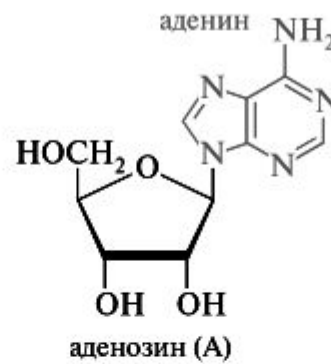
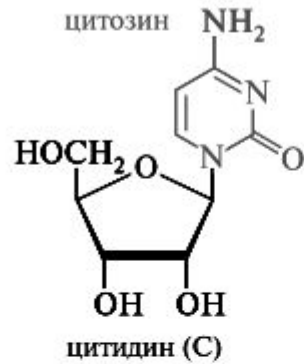
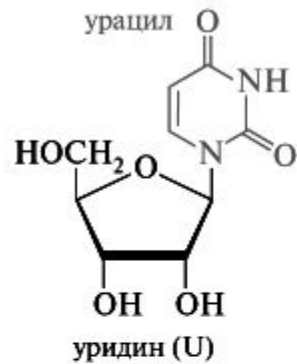
- Дезоксирибонуклеиновая кислота (ДНК) обеспечивает хранение, передачу из поколения в поколение и реализацию генетической программы развития и функционирования живых организмов.
- ДНК — длинная полимерная молекула, состоящая из повторяющихся блоков — нуклеотидов. Каждый нуклеотид состоит из азотистого основания, сахара (дезоксирибозы) и фосфатной группы.
- ДНК состоит из двух цепей, ориентированных азотистыми основаниями друг к другу.



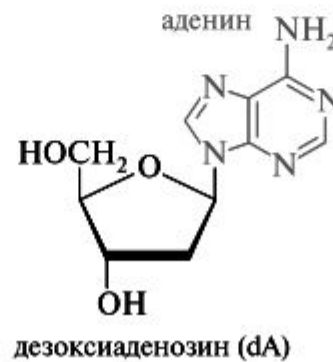
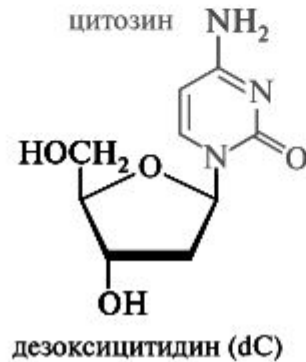
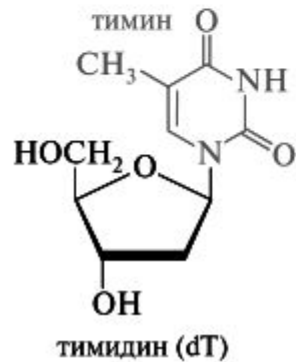
Нуклеотиды и нуклеозиды



Рибонуклеозиды



Дезоксирибонуклеозиды



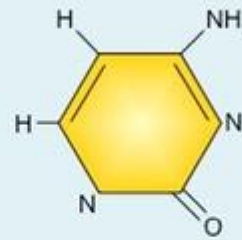
Пуриновые и пиримидиновые основания



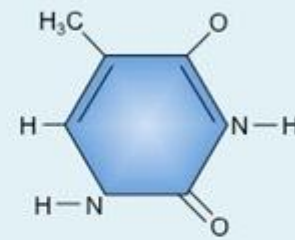
Guanine



Adenine



Cytosine



Thymine



Uracil

Purines

Pyrimidines

ДНК (дезоксирибонуклеиновая кислота) – полимер, мономерами которого являются нуклеотиды

Нуклеотид ДНК состоит

из:

Азотистое основание

Моносахарид-дезоксирибоза

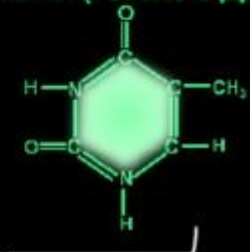
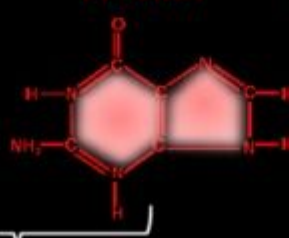
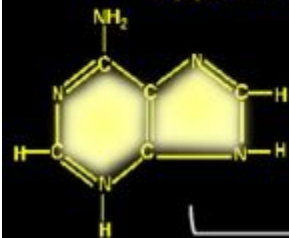
Остаток фосфорной кислоты

АДЕНИН

ГУАНИН

ЦИТОЗИН

ТИМИН (только в ДНК)

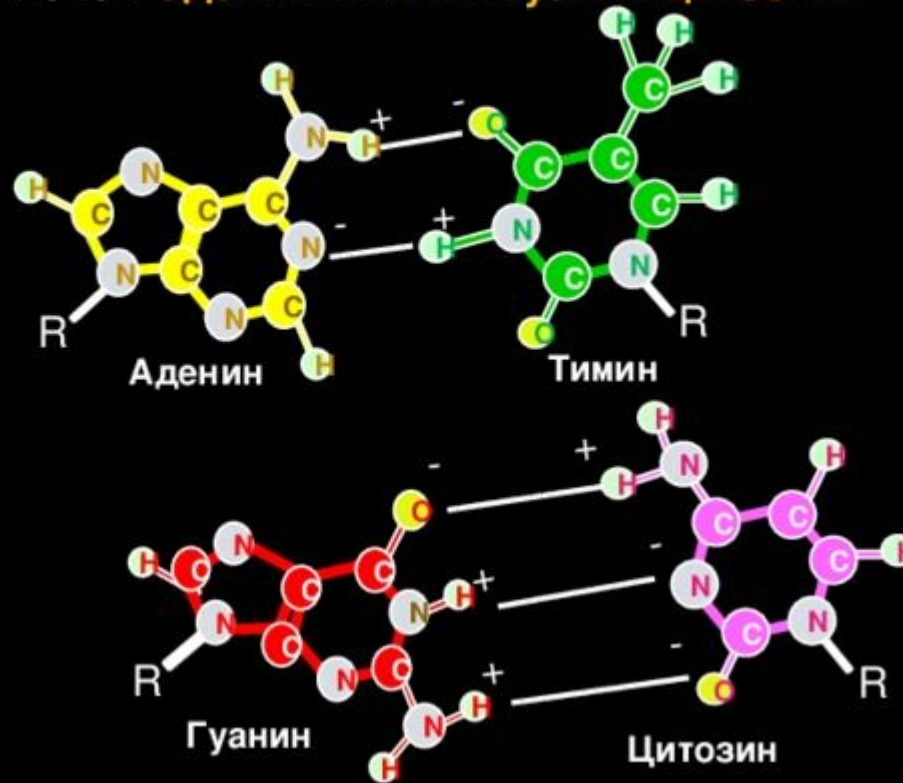


Пуриновые основания

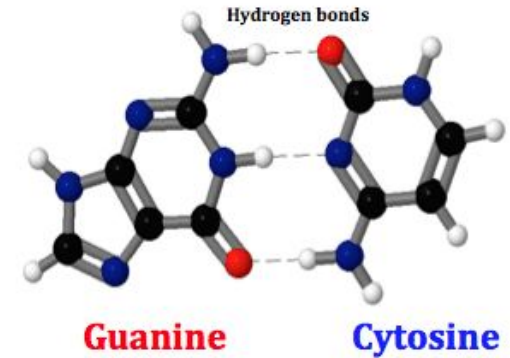
Пиримидиновые основания

Комплементарность азотистых оснований

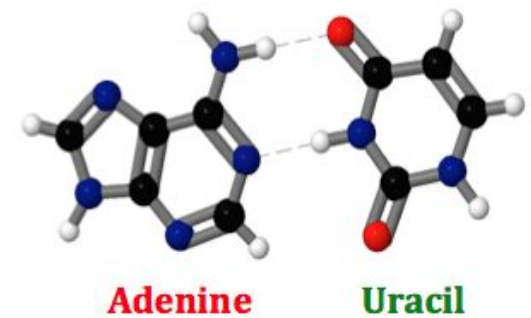
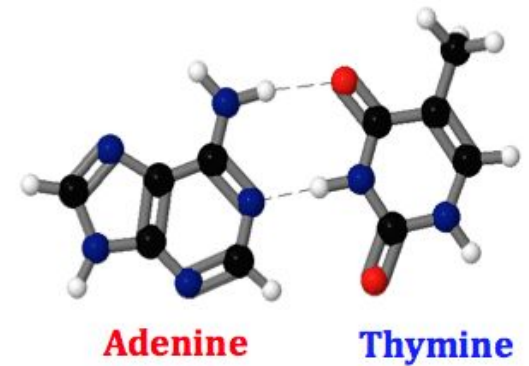
Комплементарность – свойство азотистых оснований образовывать с помощью водородных связей парные комплексы **аденин-тимин** и **гуанин-цитозин**.



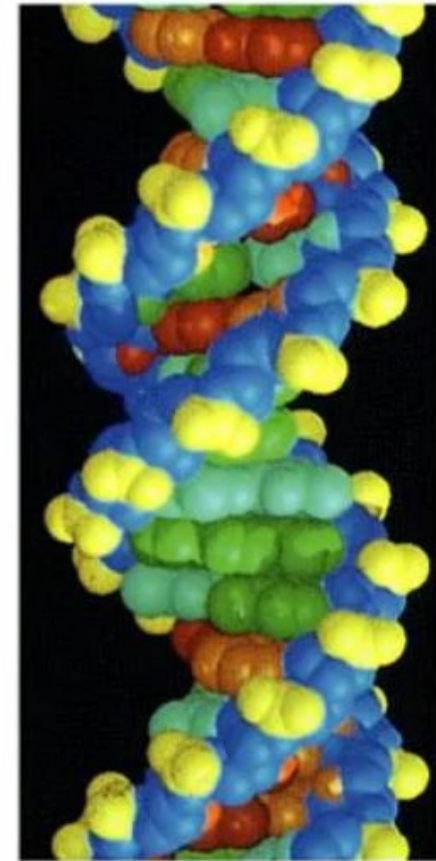
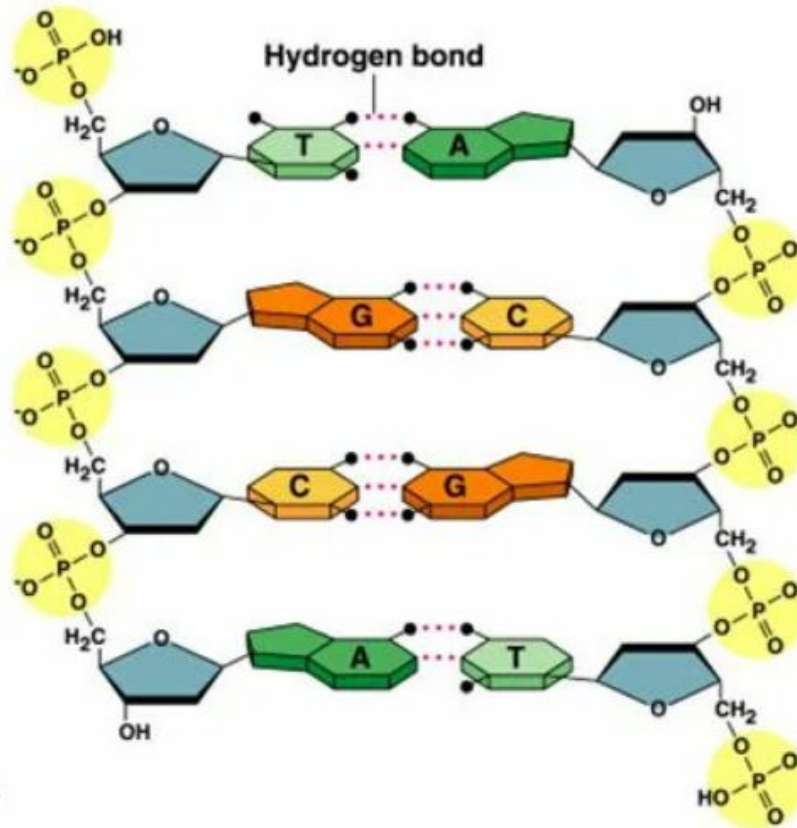
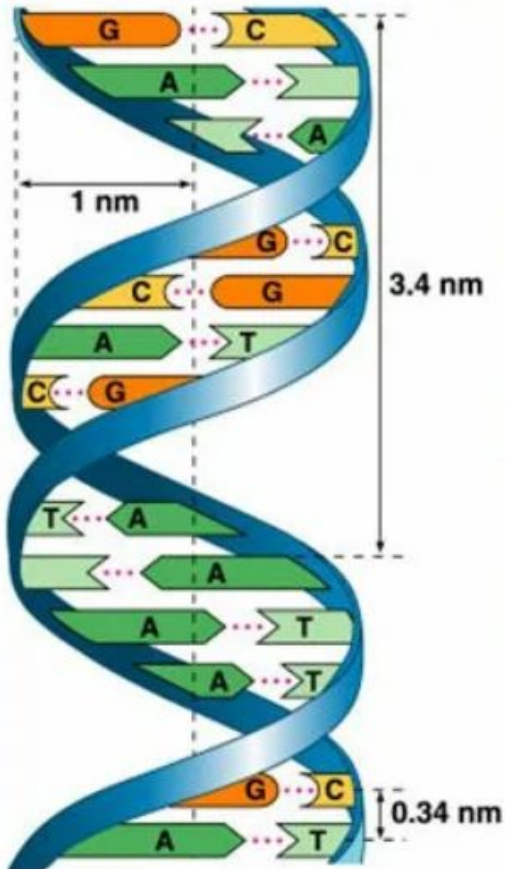
Базовые пары в ДНК и РНК



Гуанин и Цитозин, Аденин и Тимин, Аденин и Урацил могут образовывать водородные связи, определяющие вторичную структуру ДНК, РНК и механизмы синтеза белковых молекул.



Строение ДНК (вторичная структура)



РНК - биополимер, мономером которого является нуклеотид. Состоит РНК из одной цепочки (в отличие от ДНК, которая состоит из двух). В состав РНК входят нуклеотиды: А (аденин) - У (урацил), Г (гуанин) - Ц (цитозин).

Все виды РНК синтезируются на матрице - ДНК, различают три вида РНК:

Рибосомальная РНК (рРНК)

рРНК входит в состав малых и больших субъединиц рибосом. В процентном отношении рРНК составляет 80-90% всей РНК клетки.

Информационная РНК (иРНК)

Синтезируется в ядре в ходе процесса транскрипции (лат. transcriptio — переписывание). Фермент РНК-полимераза строит цепь иРНК по принципу комплементарности с ДНК. Исходя из данного принципа, гуанин (Г) в молекуле ДНК соединяется с цитозином (Ц) в РНК. Далее соответственно: цитозин (Ц) - гуанин (Г), аденин (А) - урацил (У), тимин (Т) - аденин (А).

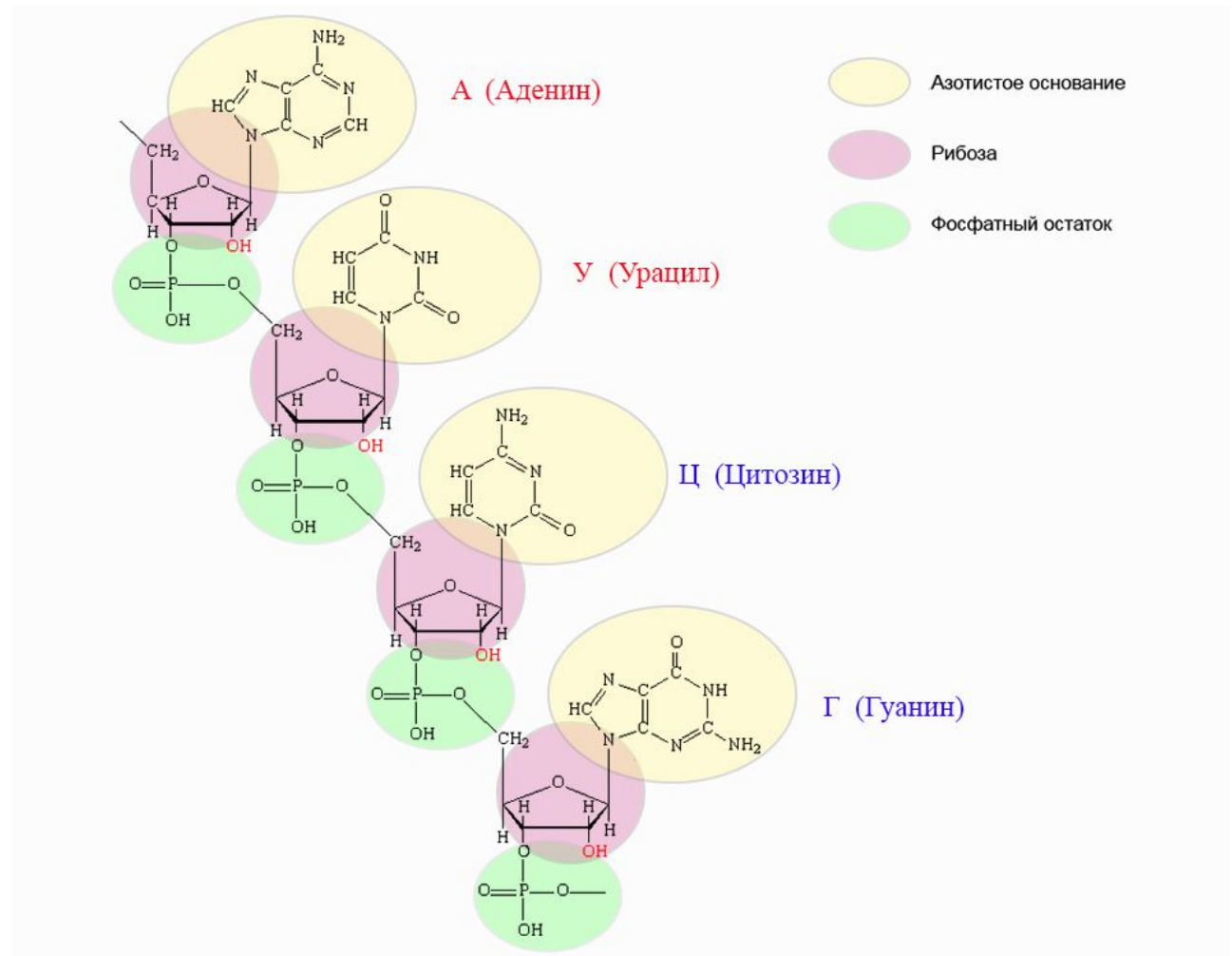
Комплементарность ДНК и РНК

Транспортная РНК (тРНК)

Обеспечивает транспорт аминокислоты к рибосоме во время синтеза белка. Благодаря этому становится возможным соединение аминокислот друг с другом, образуется белок. тРНК имеет характерную форму клеверного листа.

РНК (Рибонуклеиновая кислота)

Нуклеотиды РНК состоят из сахара - рибозы, к которой присоединено одно из оснований: аденин, гуанин, цитозин или урацил. Фосфатная группа соединяет рибозы в цепочку.

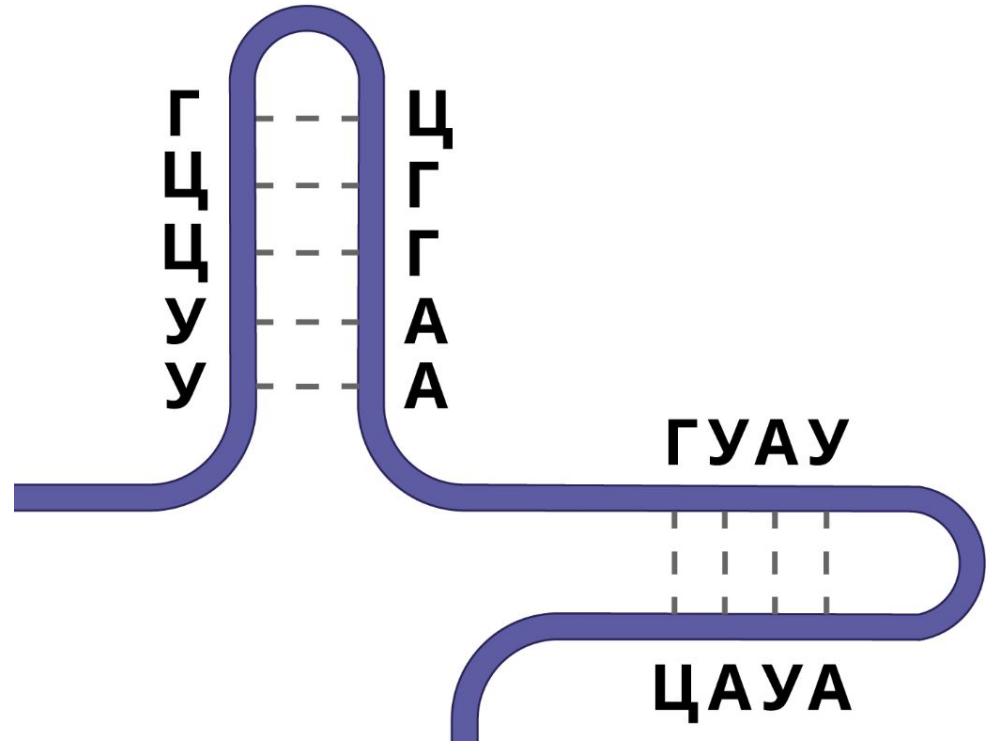


Вторичная структура РНК

Вторичная структура РНК образуется за счет водородных связей между азотистыми основаниями по правилам комплементарности:

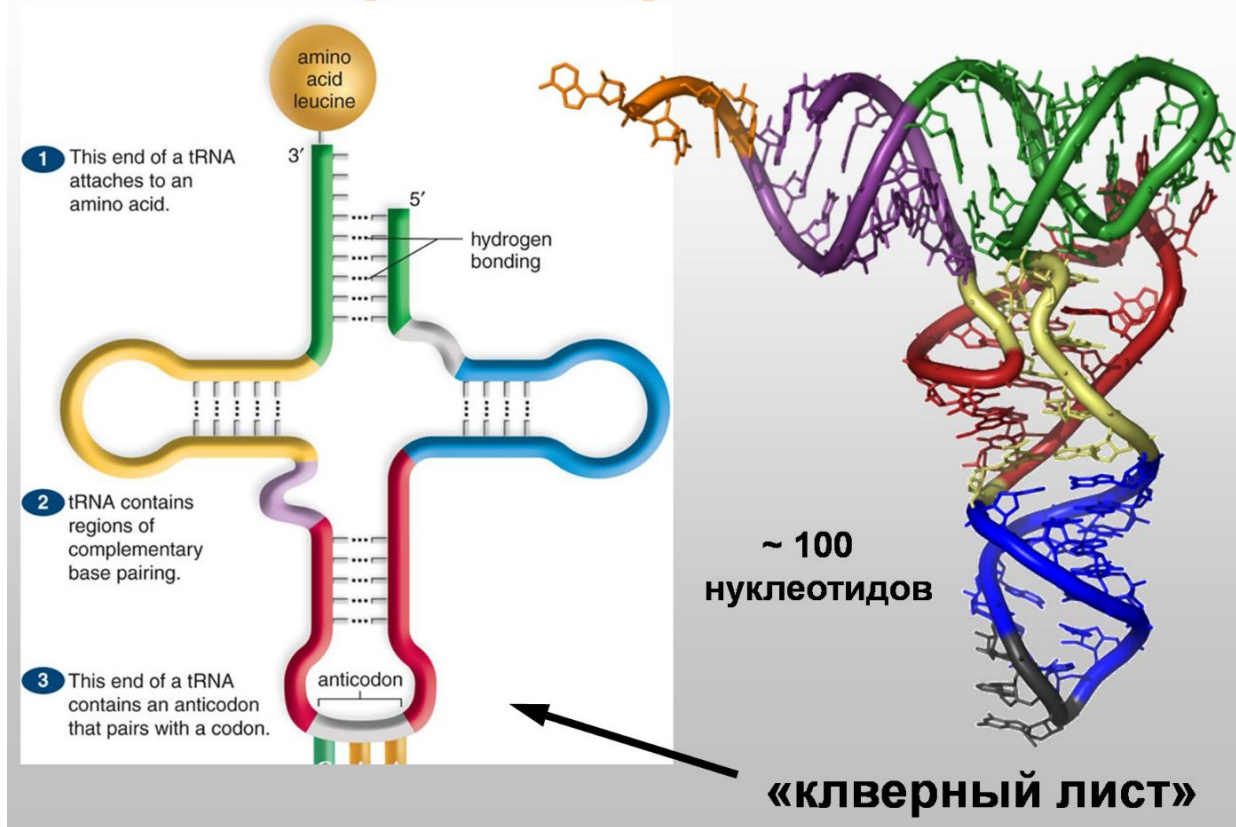
Г-Ц
А-У

В редких случаях Г-У.



Третичная структура РНК

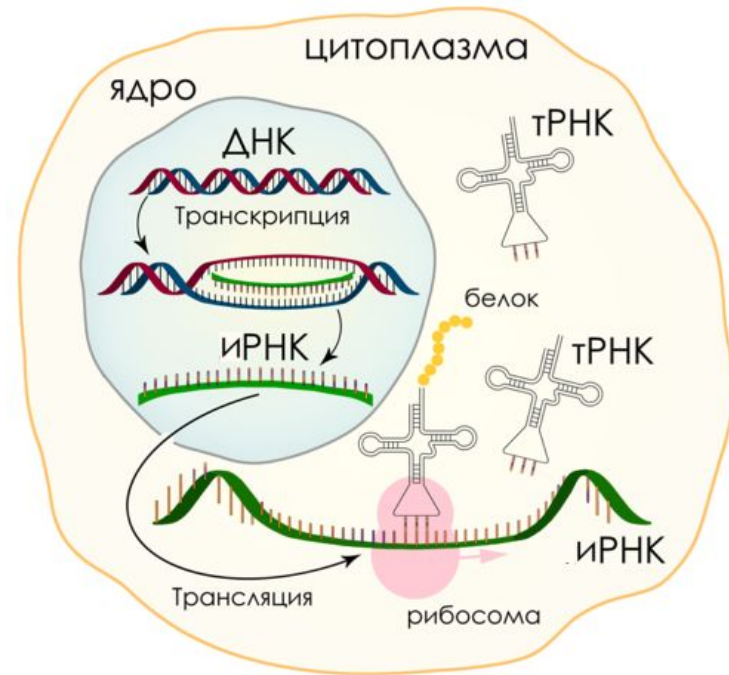
Транспортная РНК



Синтез молекул белка

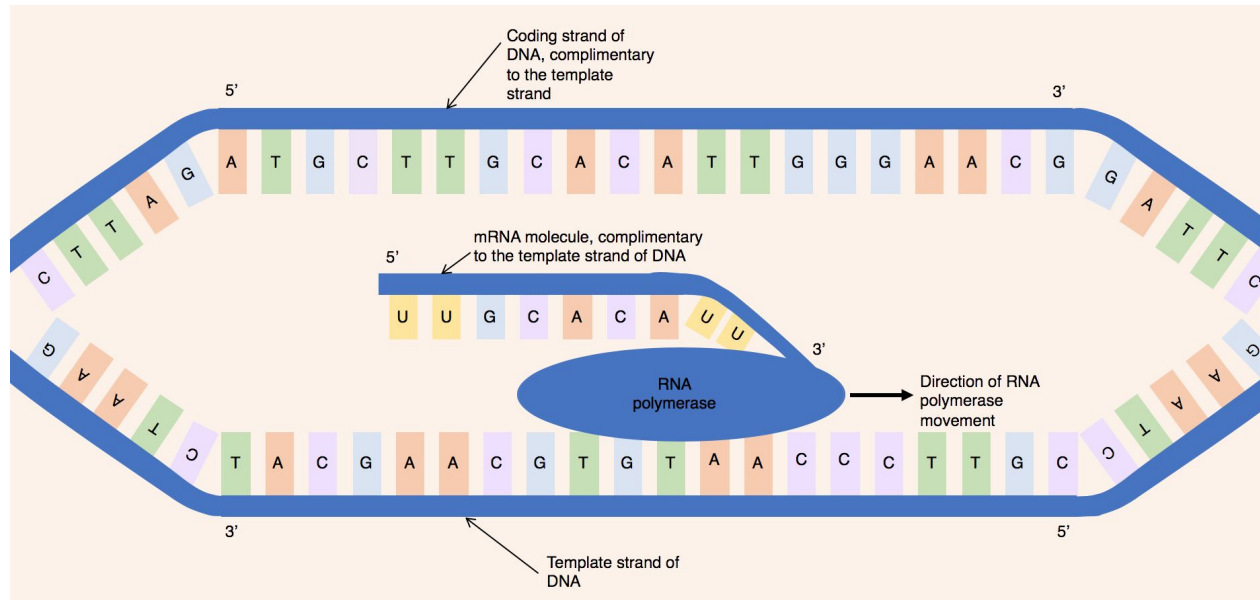
Синтез белка происходит в два этапа:

1. Транскрипция – формирование информационной РНК (иРНК или мРНК) в ядре из ДНК.
2. Трансляция – синтез белковой молекулы в цитоплазме на основе иРНК.

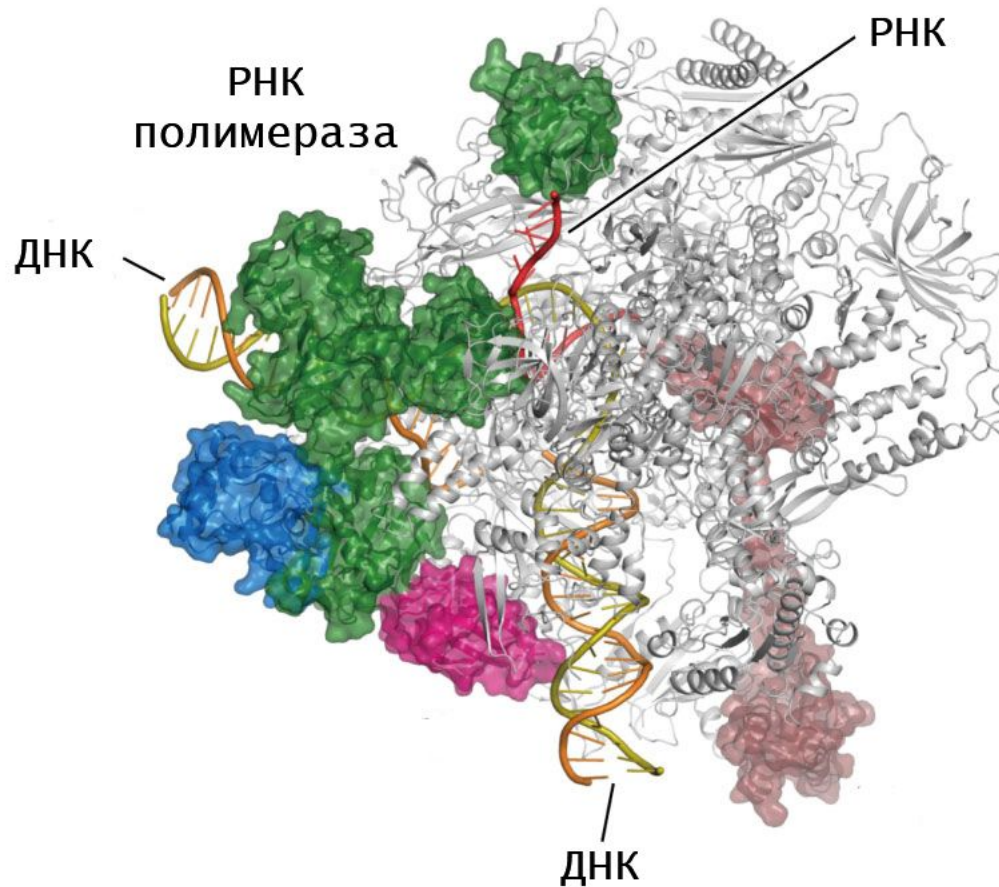


Транскрипция

- Транскрипция — происходящий во всех живых клетках процесс синтеза РНК с использованием ДНК в качестве матрицы, перенос генетической информации с ДНК на РНК.



РНК-полимераза - фермент, осуществляющий синтез молекул РНК



Правила комплементарности

- ✓ В ДНК встречается четыре вида азотистых оснований (аденин (A), гуанин (G), тимин (T) и цитозин (C)).
- ✓ Шаблонная и кодирующая цепочки ДНК выстроены в соответствии с принципом комплементарности.
- ✓ Этот же принцип используется при формировании иРНК по шаблонной цепочке ДНК с той лишь разницей, что тиамин соответствует урацилу.

Comparing base pairing rules

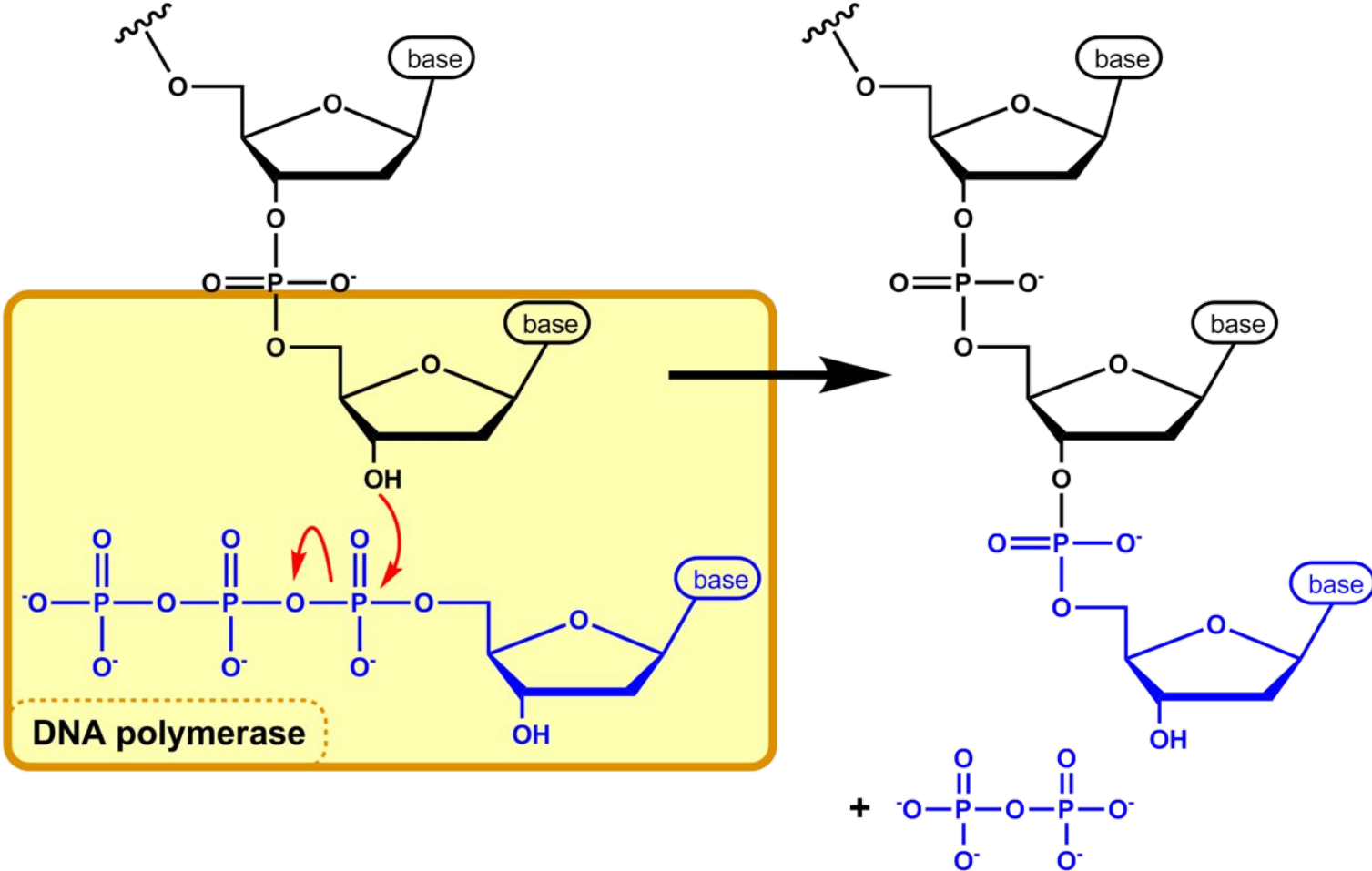
DNA to DNA	DNA to RNA
C → G	C → G
G → C	G → C
T → A	T → A
A → T	A → U

Нуклеозидтрифосфаты

Свободные нуклеозидтрифосфаты присутствуют в ядре клетки и используются РНК-полимеразой для синтеза молекулы РНК

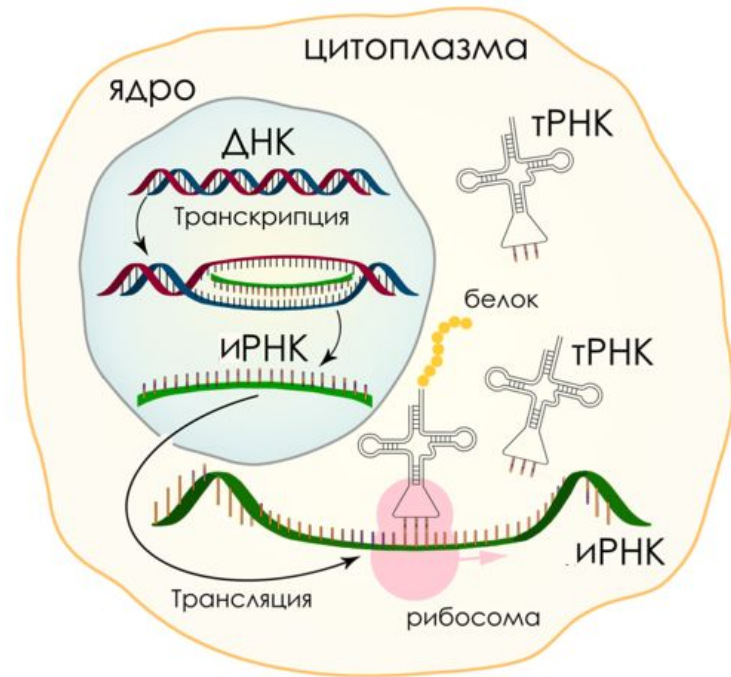


Синтез РНК



Трансляция

- Трансляция — это перевод последовательность и нуклеотидов молекулы иРНК в последовательность аминокислот молекулы белка.
- Рибосома двигается по иРНК, формируя пептидную цепочку.

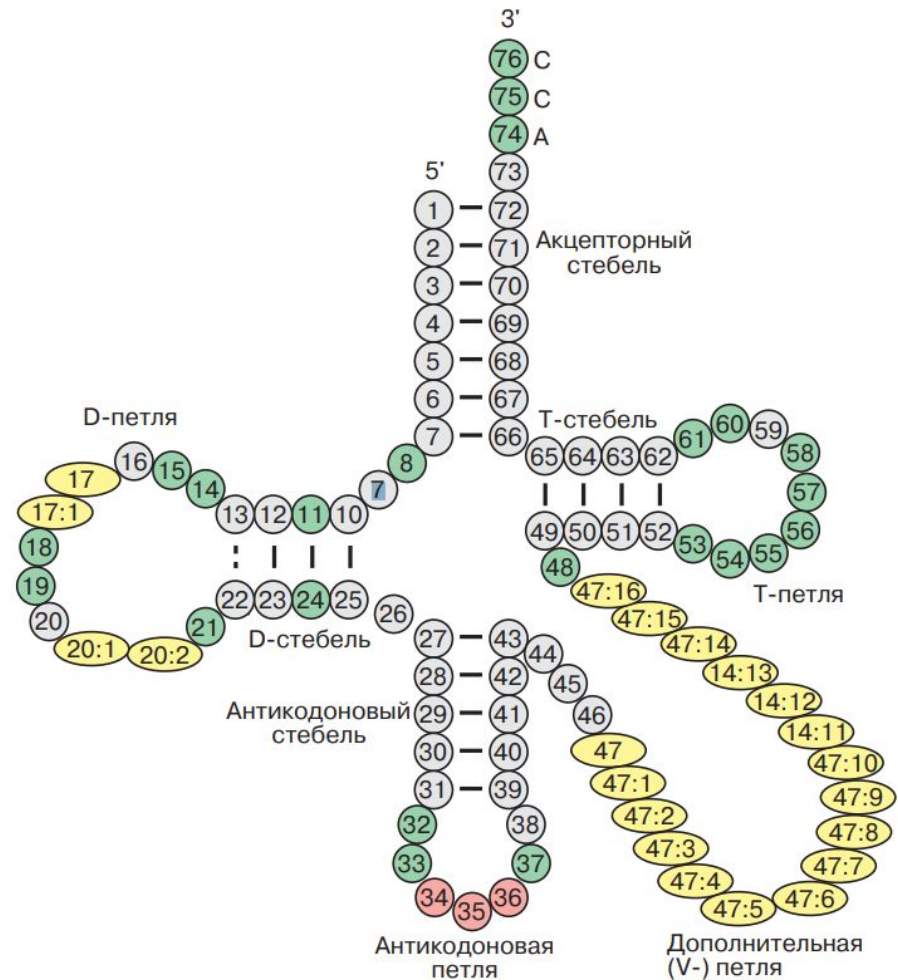


Транспортная РНК

тРНК – относительно небольшие молекулы, длина их цепей варьирует от 74 до 95 нуклеотидных остатков. Все тРНК имеют одинаковый 3'-конец, построенный из двух остатков цитозина и одного – аденозина (ССА-конец). Именно 3'-концевой аденозин связывается с аминокислотным остатком.

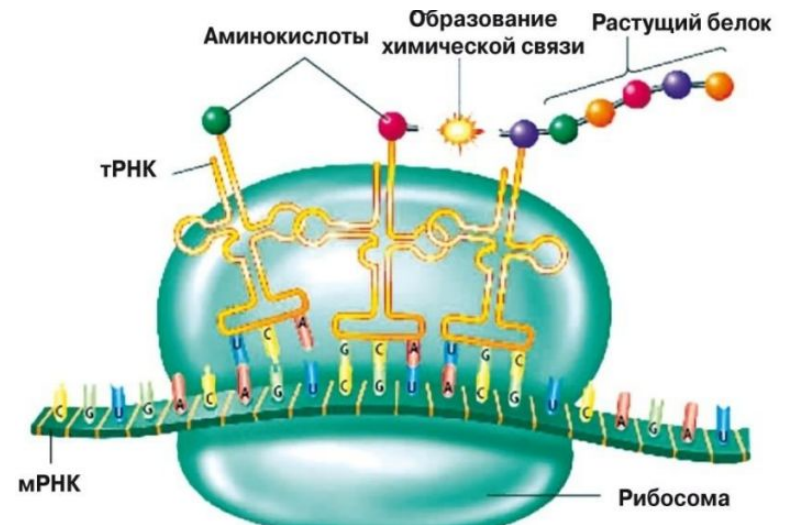
Различают две ее основные функции тРНК :

- **акцепторную** – способность ковалентно связываться с аминокислотным остатком
- **адапторную** – способность узнавать триплет генетического кода, соответствующий транспортируемой аминокислоте, и обеспечивать поступление аминокислоты на законное место в растущей цепи белка



Трансляция

- Рибосома движется вдоль иРНК, задерживаясь на каждом триплете приблизительно 0,2 секунды.
- Молекула тРНК, антикодон которой комплементарен кодону, приносит к рибосоме аминокислоту.
- Аминокислота, которая была связана с этой тРНК, отделяется от «черешка» тРНК и присоединяется с образованием пептидной связи к растущей цепочке белка. При этом формируется ковалентная пептидная связь.

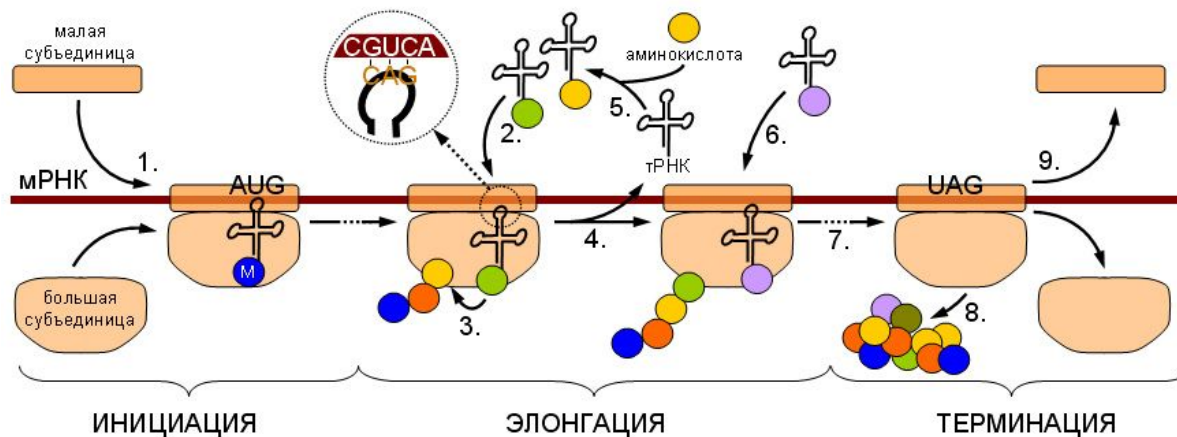


Кодоны

- Три подряд идущих азотистых основания составляют ***кодон***
- Кодонов всего 64, три из которых – т.н. стоп-кодона, которые говорят о конце синтеза (полипептидная цепь отделяется от РНК)

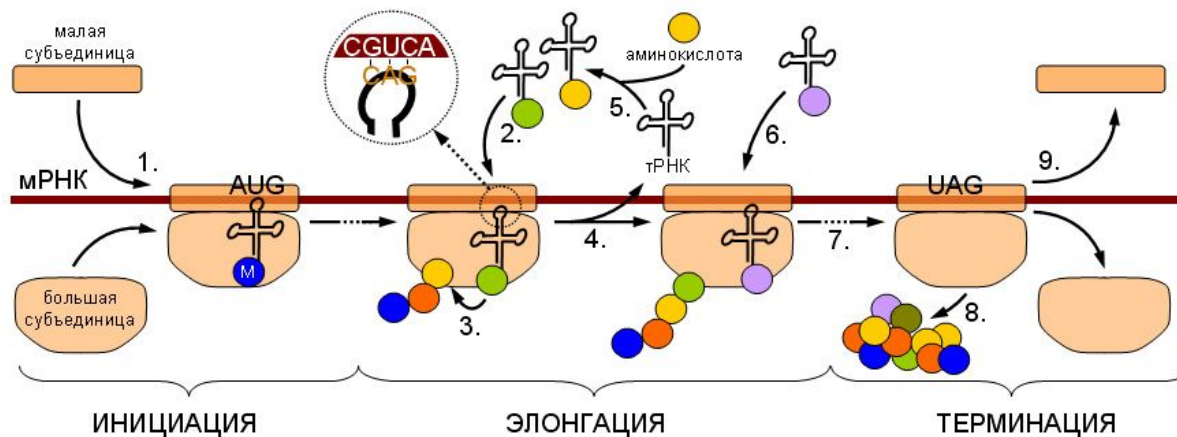
Фазы трансляции: ИНИЦИАЦИЯ

Инициация трансляции начинается с присоединения рибосомы к тому участку информационной РНК (иРНК), с которого начинается синтез белка. Начало будущего белка обозначается кодоном АУГ. Антикодон тРНК – УАЦ. К акцепторному участку тРНК присоединена аминокислота метионин.



Фазы трансляции: ЭЛОНГАЦИЯ

Затем первая тРНК уходит в цитоплазму (см. Рис. 6), где она снова присоединяет аминокислоту, а рибосома продвигается дальше на один кодон, к которому присоединяется следующая тРНК, несущая свою аминокислоту. Так происходит элонгация, то есть удлинение цепи.



Фазы трансляции: терминация

Последовательное считывание рибосомы заключенного в иРНК текста продолжается до тех пор, пока процесс не доходит до одного из стоп-кодонов (терминирующих кодонов). Этими кодоном служат триплеты: УАА, УАГ, УГА. Они не кодируют аминокислоты, а только лишь показывают, что синтез белка должен быть завершен.

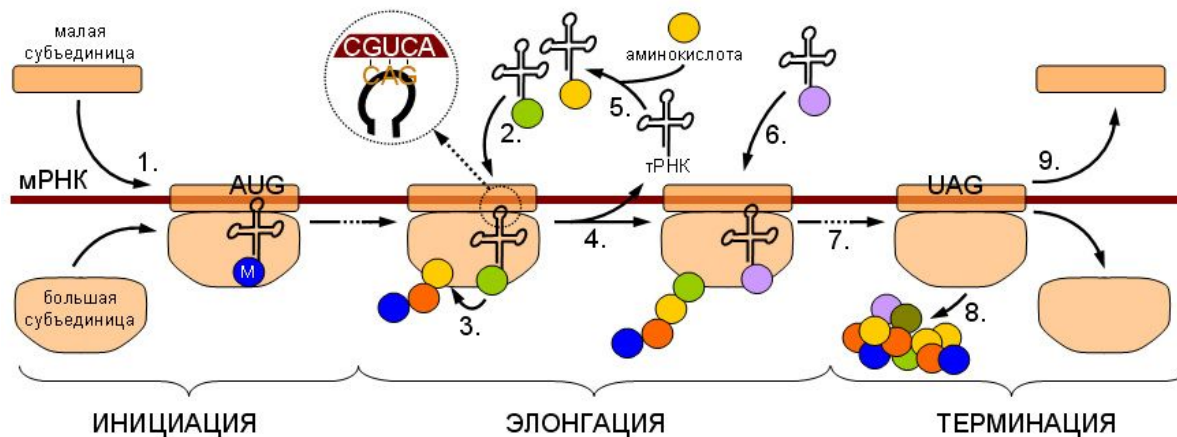


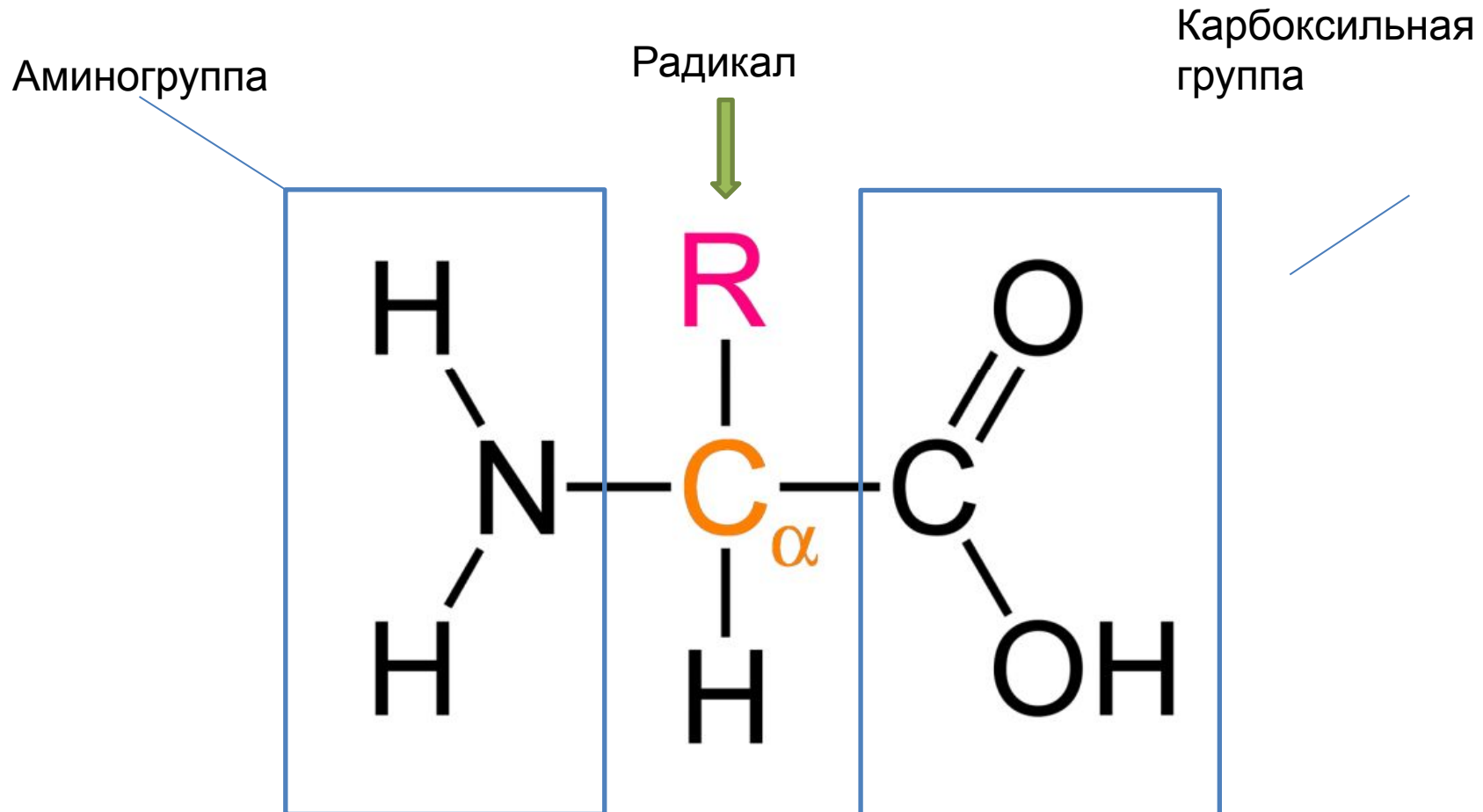
Таблица трансляции

1st position (5' end)	2nd position				3rd position (3' end)
	U	C	A	G	
U	Phe	Ser	Tyr	Cys	U C A G
	Phe	Ser	Tyr	Cys	
	Leu	Ser	STOP	STOP	
	Leu	Ser	STOP	Trp	
C	Leu	Pro	His	Arg	U C A G
	Leu	Pro	His	Arg	
	Leu	Pro	Gln	Arg	
	Leu	Pro	Gln	Arg	
A	Ile	Thr	Asn	Ser	U C A G
	Ile	Thr	Asn	Ser	
	Ile	Thr	Lys	Arg	
	Met	Thr	Lys	Arg	
G	Val	Ala	Asp	Gly	U C A G
	Val	Ala	Asp	Gly	
	Val	Ala	Glu	Gly	
	Val	Ala	Glu	Gly	

Таблица трансляции

Amino acids	Abbreviations		Codons
Alanine	Ala	A	GCA GCC GCG GCU
Cysteine	Cys	C	UGC UGU
Aspartic acid	Asp	D	GAC GAU
Glutamic acid	Glu	E	GAA GAG
Phenylalanine	Phe	F	UUC UUU
Glycine	Gly	G	GGA GGC GGG GGU
Histidine	His	H	CAC CAU
Isoleucine	Ile	I	AUA AUC AUU
Lysine	Lys	K	AAA AAG
Leucine	Leu	L	UUA UUG CUA CUC CUG CUU
Methionine	Met	M	AUG
Asparagine	Asn	N	AAC AAU
Proline	Pro	P	CCA CCC CCG CCU
Glutamine	Gln	Q	CAA CAG
Arginine	Arg	R	AGA AGG CGA CGC CGG CGU
Serine	Ser	S	AGC AGU UCA UCC UCG UCU
Threonine	Thr	T	ACA ACC ACG ACU
Valine	Val	V	GUA GUC GUG GUU
Tryptophan	Trp	W	UGG
Tyrosine	Tyr	Y	UAC UAU

Аминокислота

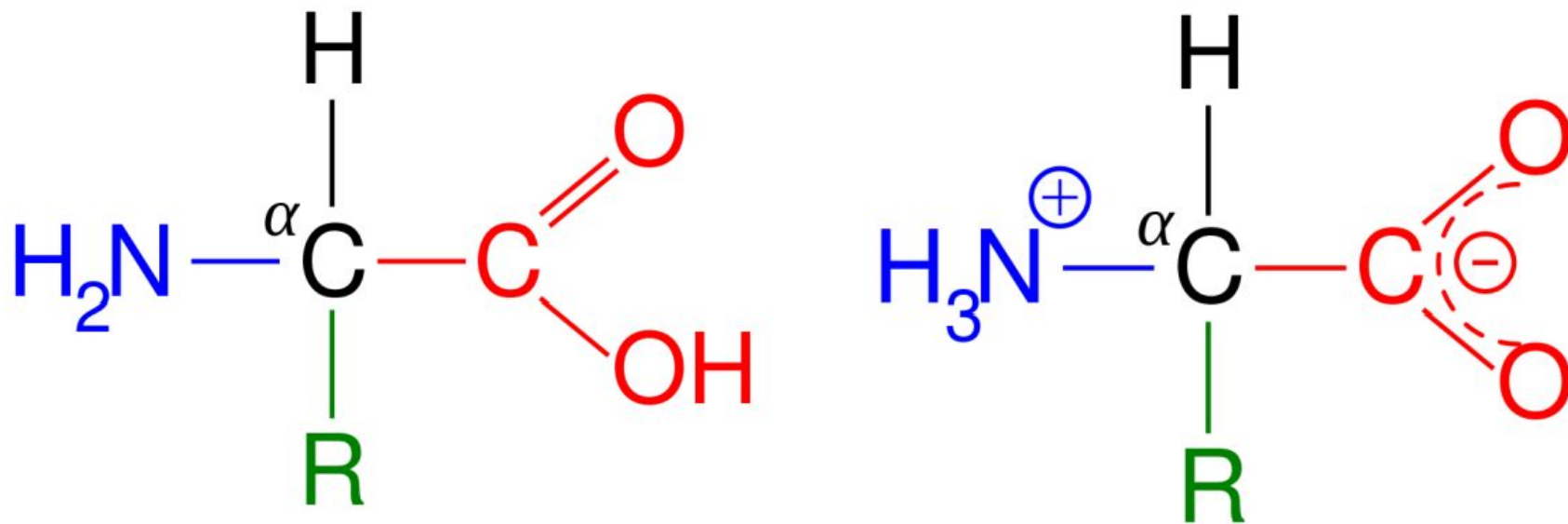


Соединение, в котором одновременно есть карбоксильная группа и аминогруппа, называется **аминокислотой**.

Ионизация аминокислот

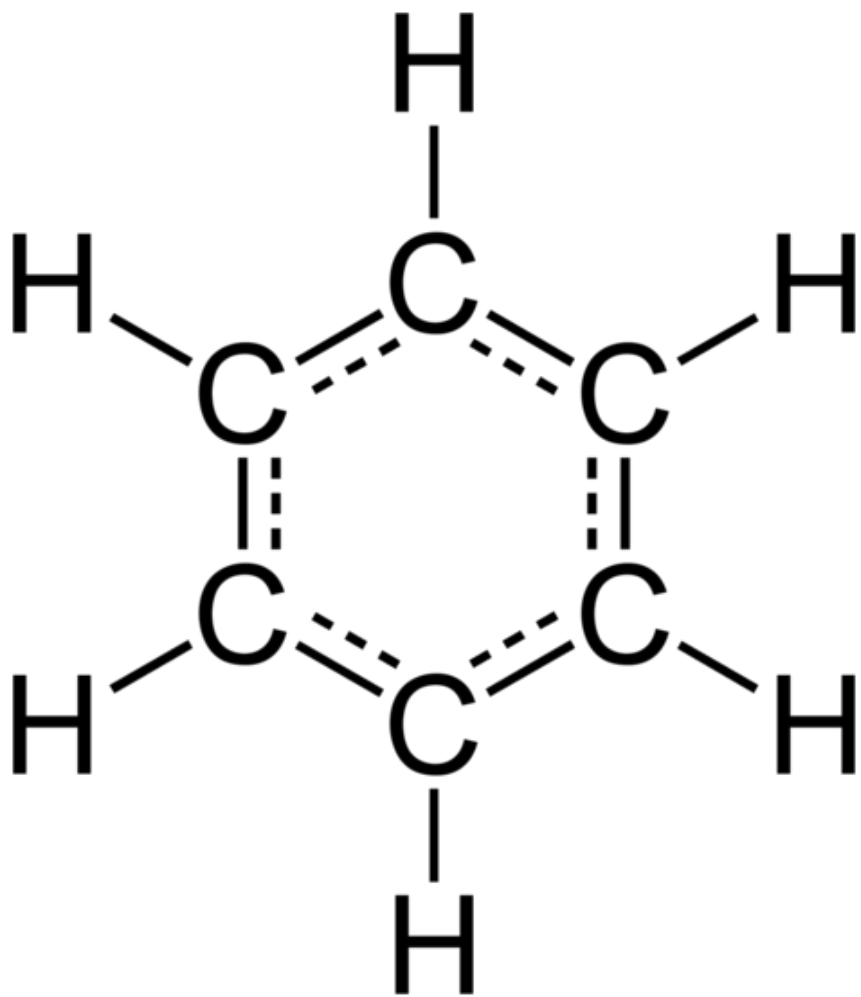
Аминогруппа и карбоксильная группа в водном растворе ионизируются. Слева - стандартный вид, справа - цвиттер-ион, где карбоксильная группа потеряла протон, а аминогруппа, наоборот, приобрела его.

Отрицательный заряд в цвиттер-ионе на самом деле делокализован ("размазан") между двумя атомами кислорода карбоксильной группы, а не привязан строго к одному из них.

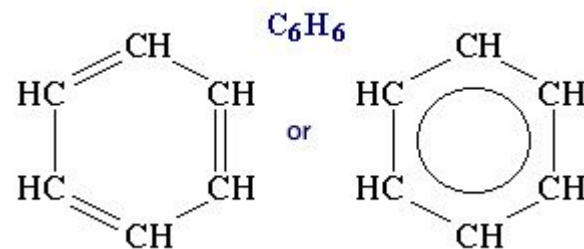


$\text{H}_3\text{N}^+-\text{CH}-\text{C}(=\text{O})\text{O}^-$ $\quad \quad \quad \text{H}$	$\text{H}_3\text{N}^+-\text{CH}-\text{C}(=\text{O})\text{O}^-$ $\quad \quad \quad \text{CH}_3$	$\text{H}_3\text{N}^+-\text{CH}-\text{C}(=\text{O})\text{O}^-$ $\quad \quad \quad \text{CH}$ $\quad \quad \quad \text{H}_3\text{C} \quad \text{CH}_3$	$\text{H}_3\text{N}^+-\text{CH}-\text{C}(=\text{O})\text{O}^-$ $\quad \quad \quad \text{CH}_2$ $\quad \quad \quad \text{CH}$ $\quad \quad \quad \text{H}_3\text{C} \quad \text{CH}_3$
Glycine Gly G	Alanine Ala A	Valine Val V	Leucine Leu L
$\text{H}_3\text{N}^+-\text{CH}-\text{C}(=\text{O})\text{O}^-$ $\quad \quad \quad \text{CH}$ $\quad \quad \quad \text{H}_2\text{C} \quad \text{CH}_3$ $\quad \quad \quad \text{H}_3\text{C}$	$\text{H}_3\text{N}^+-\text{CH}-\text{C}(=\text{O})\text{O}^-$ $\quad \quad \quad \text{CH}_2$ $\quad \quad \quad \text{OH}$	$\text{H}_3\text{N}^+-\text{CH}-\text{C}(=\text{O})\text{O}^-$ $\quad \quad \quad \text{CH}$ $\quad \quad \quad \text{H}_3\text{C} \quad \text{OH}$	$\text{H}_3\text{N}^+-\text{CH}-\text{C}(=\text{O})\text{O}^-$ $\quad \quad \quad \text{CH}_2$ $\quad \quad \quad \text{SH}$
Isoleucine Ile I	Serine Ser S	Threonine Thr T	Cysteine Cys C
$\text{H}_3\text{N}^+-\text{CH}-\text{C}(=\text{O})\text{O}^-$ $\quad \quad \quad \text{CH}_2$ $\quad \quad \quad \text{CH}_2$ $\quad \quad \quad \text{S}$ $\quad \quad \quad \text{CH}_3$	$\text{H}_2\text{N}^+-\text{CH}-\text{C}(=\text{O})\text{O}^-$ $\quad \quad \quad \text{Cyclohexane ring}$	$\text{H}_3\text{N}^+-\text{CH}-\text{C}(=\text{O})\text{O}^-$ $\quad \quad \quad \text{CH}_2$ $\quad \quad \quad \text{C}_6\text{H}_5$	$\text{H}_3\text{N}^+-\text{CH}-\text{C}(=\text{O})\text{O}^-$ $\quad \quad \quad \text{CH}_2$ $\quad \quad \quad \text{C}_6\text{H}_4$ $\quad \quad \quad \text{OH}$
Methionine Met M	Proline Pro P	Phenylalanine Phe F	Tyrosine Tyr Y
$\text{H}_3\text{N}^+-\text{CH}-\text{C}(=\text{O})\text{O}^-$ $\quad \quad \quad \text{CH}_2$ $\quad \quad \quad \text{Indole ring}$	$\text{H}_3\text{N}^+-\text{CH}-\text{C}(=\text{O})\text{O}^-$ $\quad \quad \quad \text{CH}_2$ $\quad \quad \quad \text{C}(=\text{O})\text{O}^-$	$\text{H}_3\text{N}^+-\text{CH}-\text{C}(=\text{O})\text{O}^-$ $\quad \quad \quad \text{CH}_2$ $\quad \quad \quad \text{CH}_2$ $\quad \quad \quad \text{C}(=\text{O})\text{O}^-$	$\text{H}_3\text{N}^+-\text{CH}-\text{C}(=\text{O})\text{O}^-$ $\quad \quad \quad \text{CH}_2$ $\quad \quad \quad \text{C}(=\text{O})\text{NH}_2$
Tryptophan Trp W	Aspartic acid Asp D	Glutamic acid Glu E	Asparagine Asn N
$\text{H}_3\text{N}^+-\text{CH}-\text{C}(=\text{O})\text{O}^-$ $\quad \quad \quad \text{CH}_2$ $\quad \quad \quad \text{CH}_2$ $\quad \quad \quad \text{CH}_2$ $\quad \quad \quad \text{C}(=\text{O})\text{NH}_2$	$\text{H}_3\text{N}^+-\text{CH}-\text{C}(=\text{O})\text{O}^-$ $\quad \quad \quad \text{CH}_2$ $\quad \quad \quad \text{CH}_2$ $\quad \quad \quad \text{CH}_2$ $\quad \quad \quad \text{CH}_2$ $\quad \quad \quad \text{H}_3\text{N}^+$	$\text{H}_3\text{N}^+-\text{CH}-\text{C}(=\text{O})\text{O}^-$ $\quad \quad \quad \text{CH}_2$ $\quad \quad \quad \text{CH}_2$ $\quad \quad \quad \text{CH}_2$ $\quad \quad \quad \text{NH}$ $\quad \quad \quad \text{C}(=\text{NH}_2^+)\text{NH}_2$	$\text{H}_3\text{N}^+-\text{CH}-\text{C}(=\text{O})\text{O}^-$ $\quad \quad \quad \text{CH}_2$ $\quad \quad \quad \text{Imidazole ring}$
Glutamine Gln Q	Lysine Lys K	Arginine Arg R	Histidine His H

Бензольное кольцо



- Молекулы бензола C₆H₆ содержит шесть атомов углерода, соединенных в цикл с чередующимися одинарными и двойными связями.
- Все шесть связей между атомами углерода в бензоле одинаковы: электроны, образующие двойные связи, делокализованы (“размазаны”) между ними.



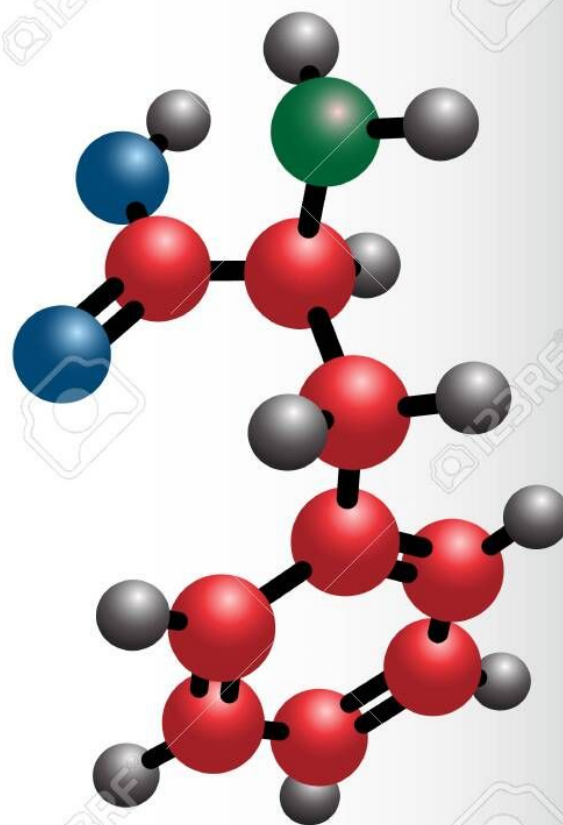
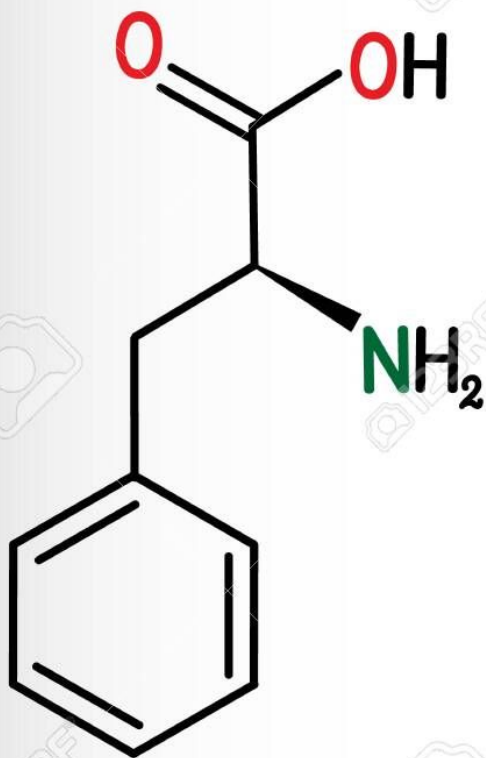
Ароматические аминокислоты

Ароматическая аминокислота (ААА)
представляет собой аминокислоту , которая
включает в себя ароматическое (бензольное)
кольцо

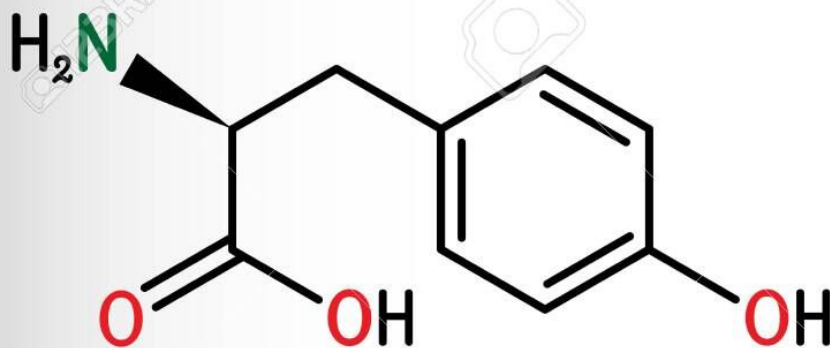
- Фенилаланин
- Триптофан
- Тирозин
- Гистидин

Фенилаланин

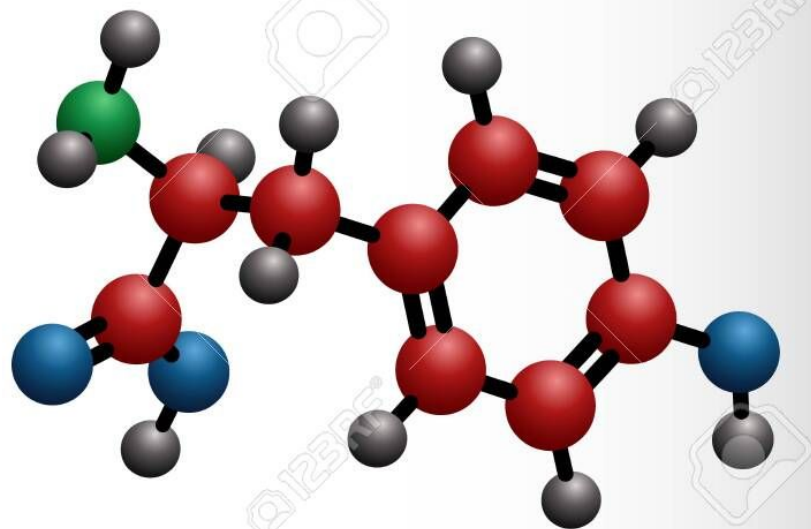
Phenylalanine



Тирозин



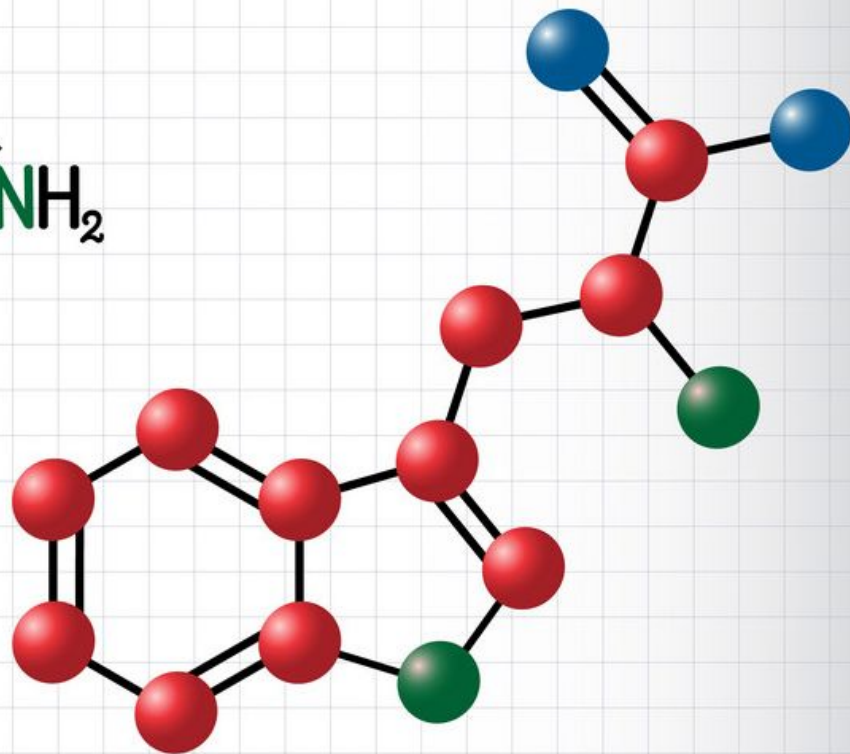
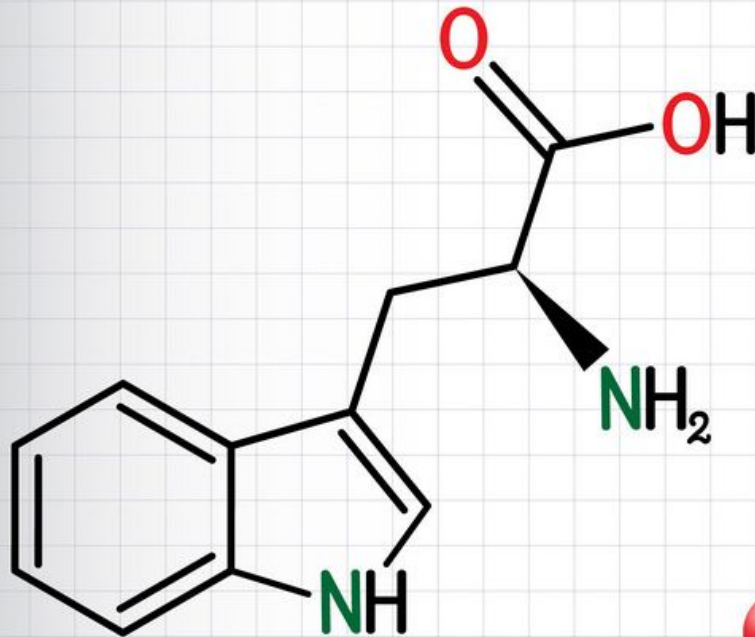
Tyrosine



$\text{C}_9\text{H}_{11}\text{NO}_3$

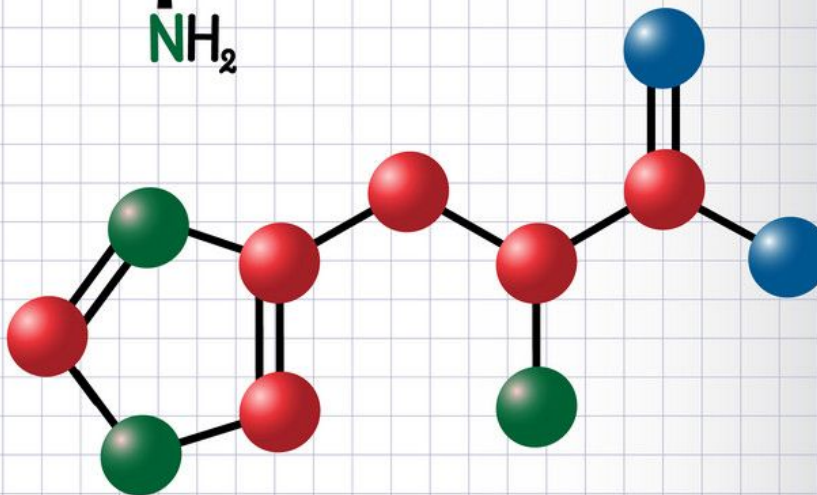
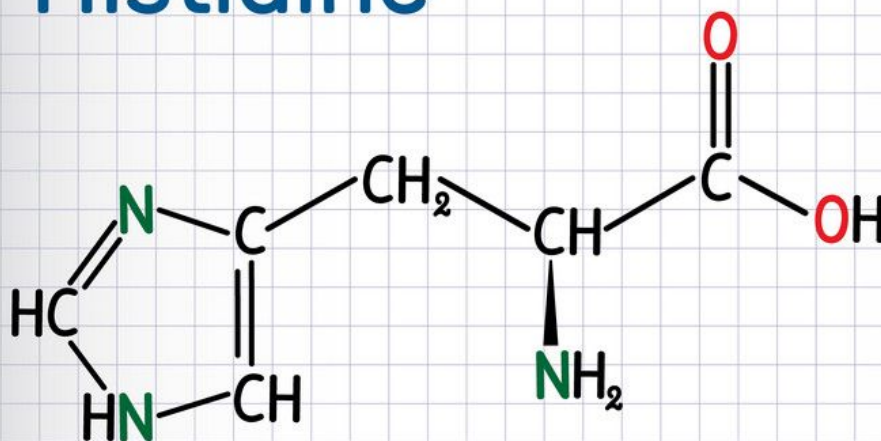
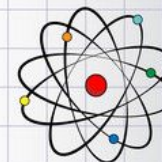
Триптофан

Tryptophan



ГИСТИДИН

Histidine

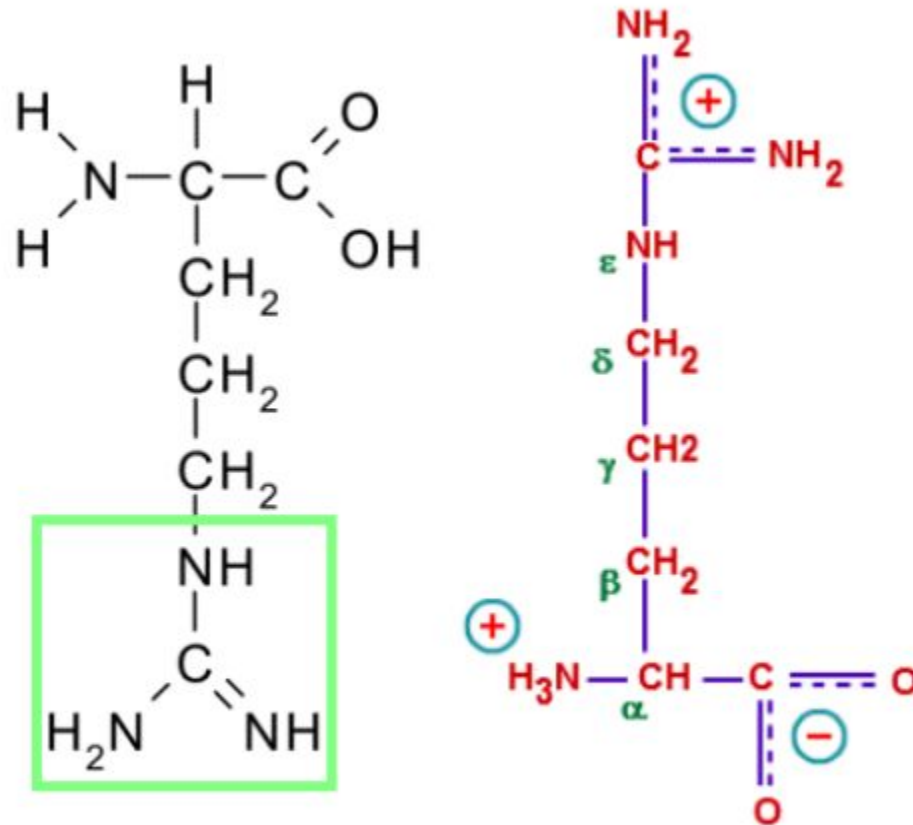


Заряд аминокислоты

Можно разделить известные нам аминокислоты на четыре группы по типам радикалов:

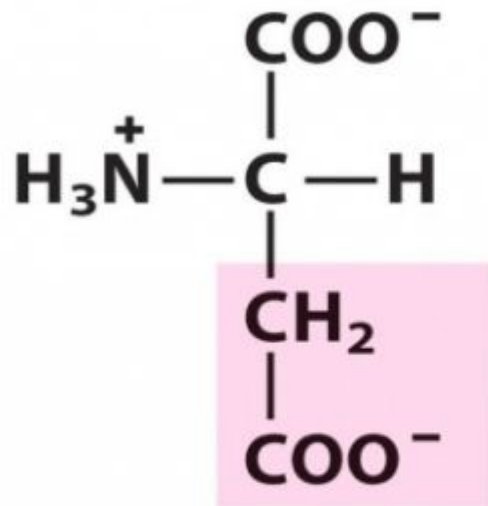
- Нейтральные гидрофобные (аланин, валин, лейцин, изолейцин, фенилаланин).
- Нейтральные гидрофильные (серин, цистеин, тирозин).
- Отрицательно заряженные (аспартат, глутамат).
- Положительно заряженные (лизин, аргинин).

Пример положительно заряженной аминокислоты

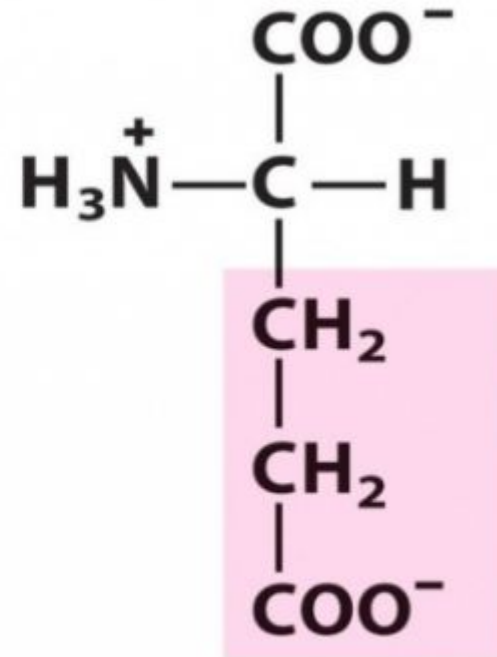


аргинин

Примеры отрицательно заряженных аминокислот



аспарагиновая кислота
(аспартат)



глутаминовая кислота
(глутамат)

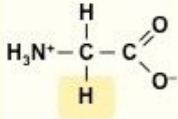
Типы аминокислот

Amino acid	Single Letter Code	Three Letter Code	Charge (+/-/neutral)	Polarity
alanine	A	Ala	neutral	nonpolar
arginine	R	Arg	+ve	polar
asparagine	N	Asn	neutral	polar
aspartate	D	Asp	-ve	polar
cysteine	C	Cys	neutral	polar
glycine	G	Gly	neutral	nonpolar
glutamine	Q	Gln	neutral	polar
glutamate	E	Glu	-ve	polar
histidine	H	His	+ve	polar
isoleucine	I	Ile	neutral	nonpolar
leucine	L	Leu	neutral	nonpolar
lysine	K	Lys	+ve	polar
methionine	M	Met	neutral	nonpolar
phenylalanine	F	Phe	neutral	nonpolar
proline	P	Pro	neutral	nonpolar
serine	S	Ser	neutral	polar
threonine	T	Thr	neutral	polar
tryptophan	W	Trp	neutral	nonpolar
tyrosine	Y	Tyr	neutral	polar
valine	V	Val	neutral	nonpolar

Полярные - гидрофильные.

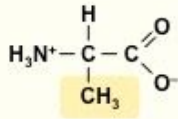
Неполярные - гидрофобные.

NON-POLAR



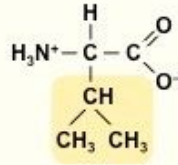
Glycine

(Gly / G)



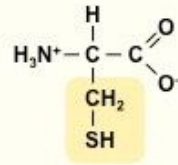
Alanine

(Ala / A)



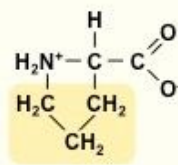
Valine

(Val / V)



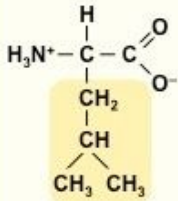
Cysteine

(Cys / C)



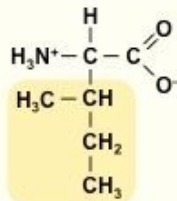
Proline

(Pro / P)



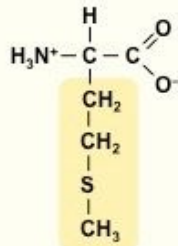
Leucine

(Leu / L)



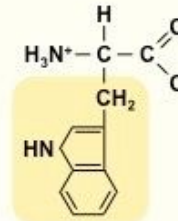
Isoleucine

(Ile / I)



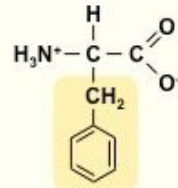
Methionine

(Met / M)



Tryptophan

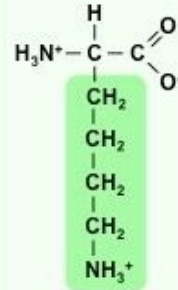
(Trp / W)



Phenylalanine

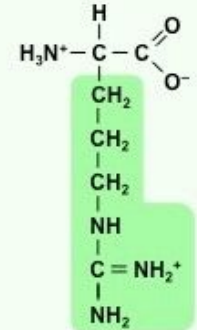
(Phe / F)

+ CHARGE



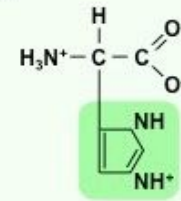
Lysine

(Lys / K)



Arginine

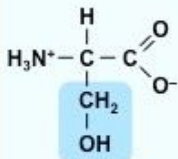
(Arg / R)



Histidine

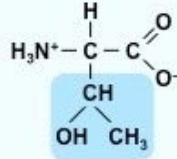
(His / H)

POLAR



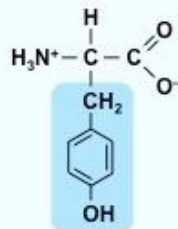
Serine

(Ser / S)



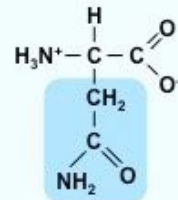
Threonine

(Thr / T)



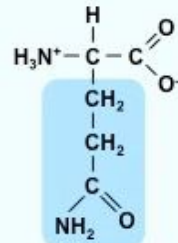
Tyrosine

(Tyr / Y)



Asparagine

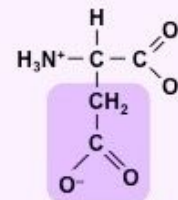
(Asn / N)



Glutamine

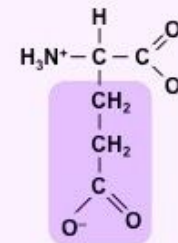
(Gln / Q)

- CHARGE



Aspartic Acid

(Asp / D)



Glutamic Acid

(Glu / E)