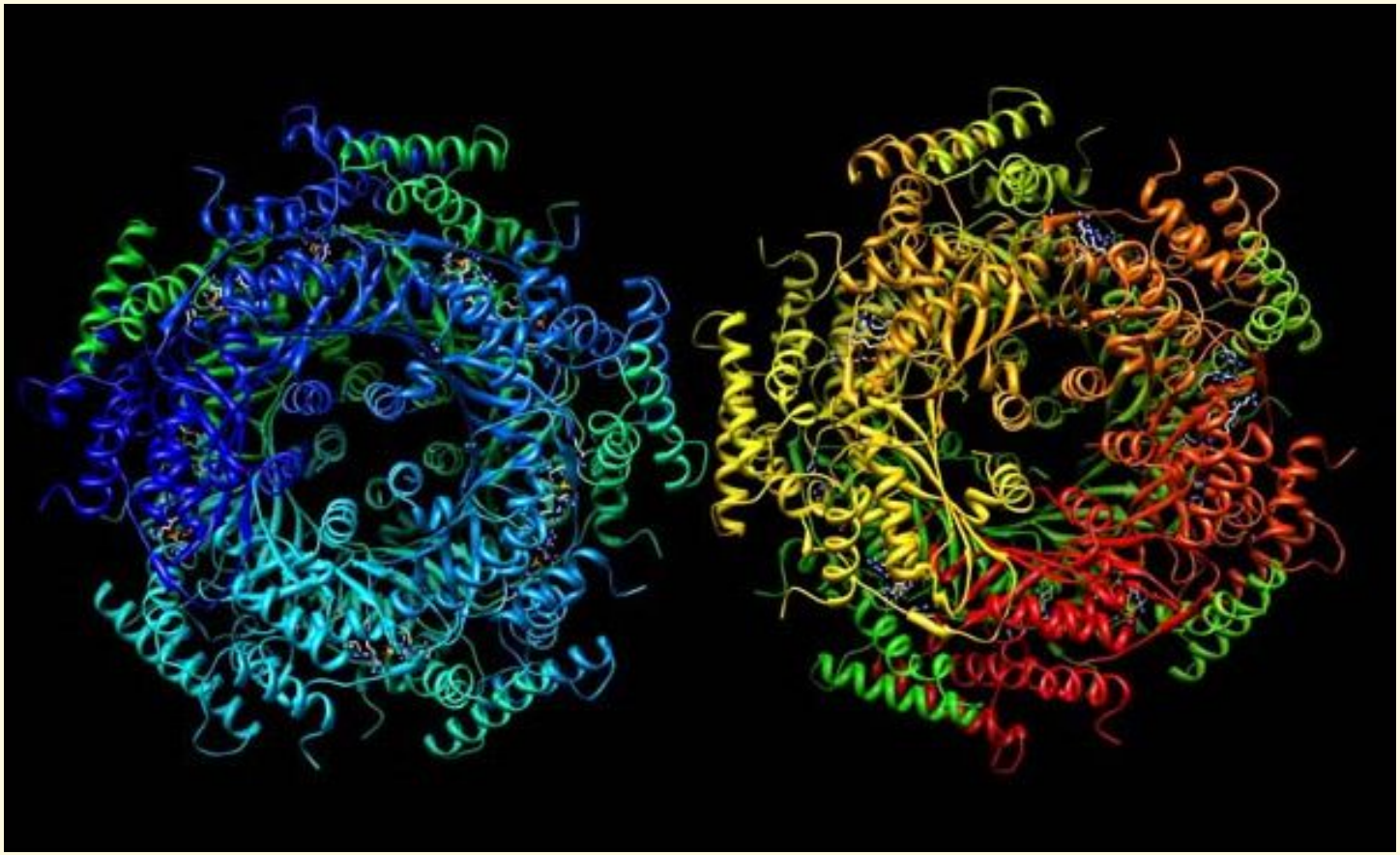


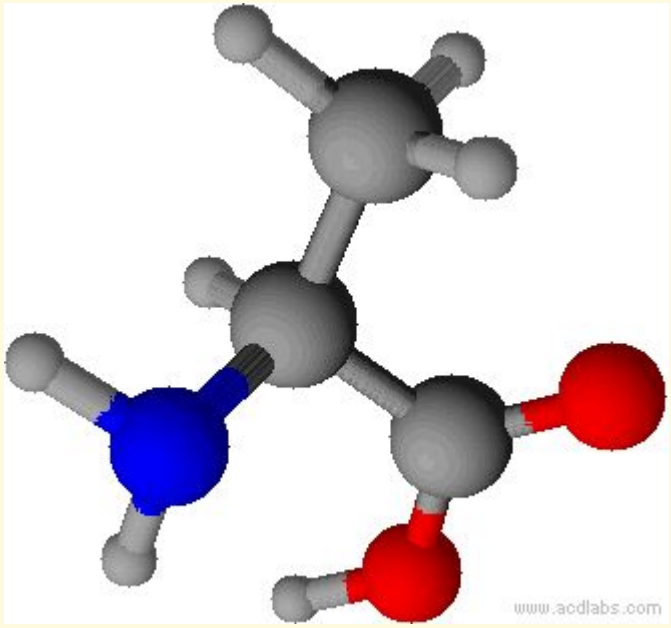
# 3D-структура белков

**(введение во введение и повторение школьных знаний)**

**А.Б.Рахманинова, Д.А.Равчеев, 2009**

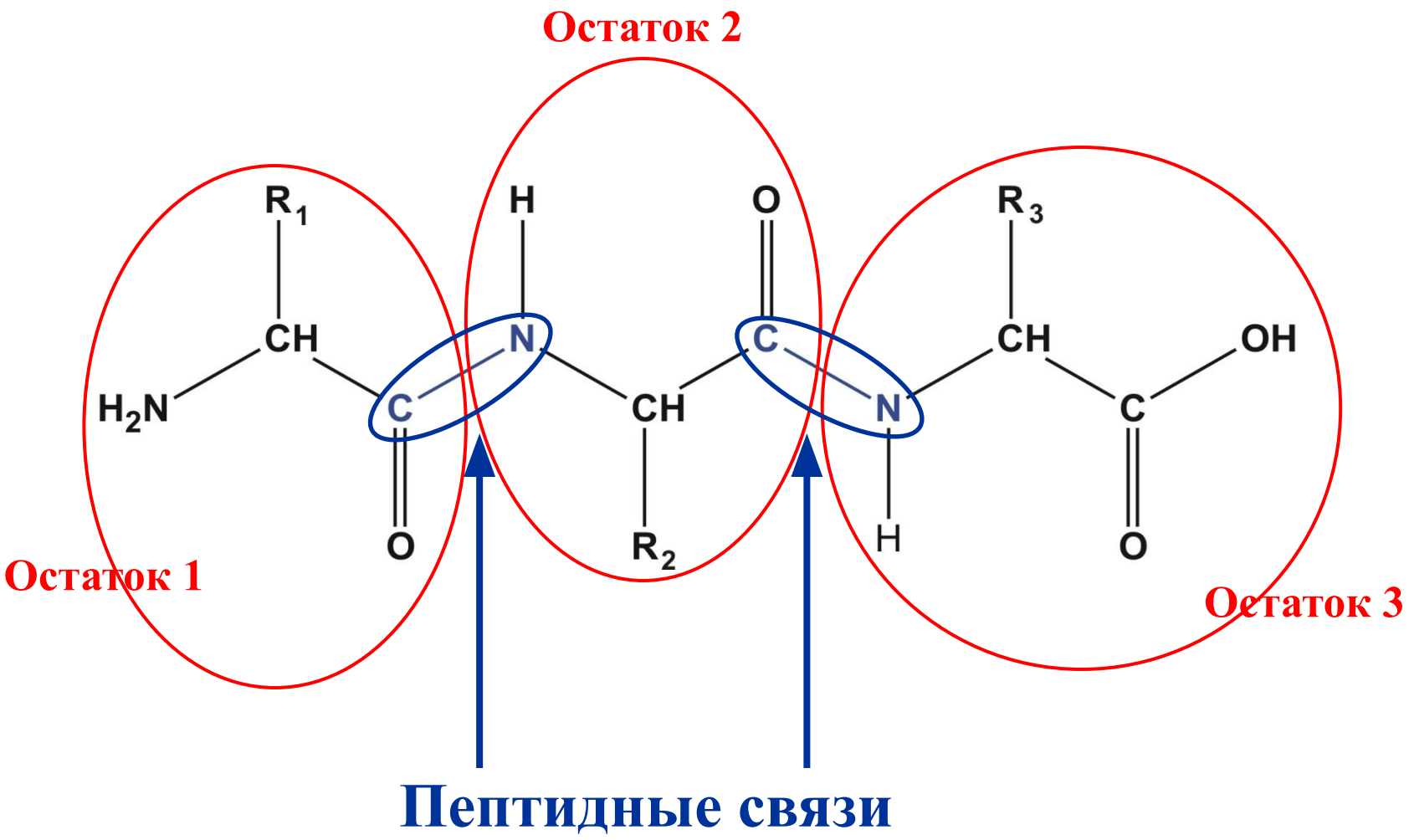
# Что такое белок?

Белок – линейный гетерополимер, мономерами которого являются L-α-аминокарбоновые кислоты

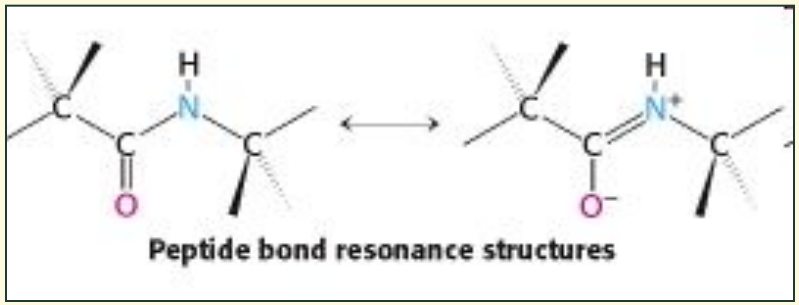



L-аланин

# Пептидная связь

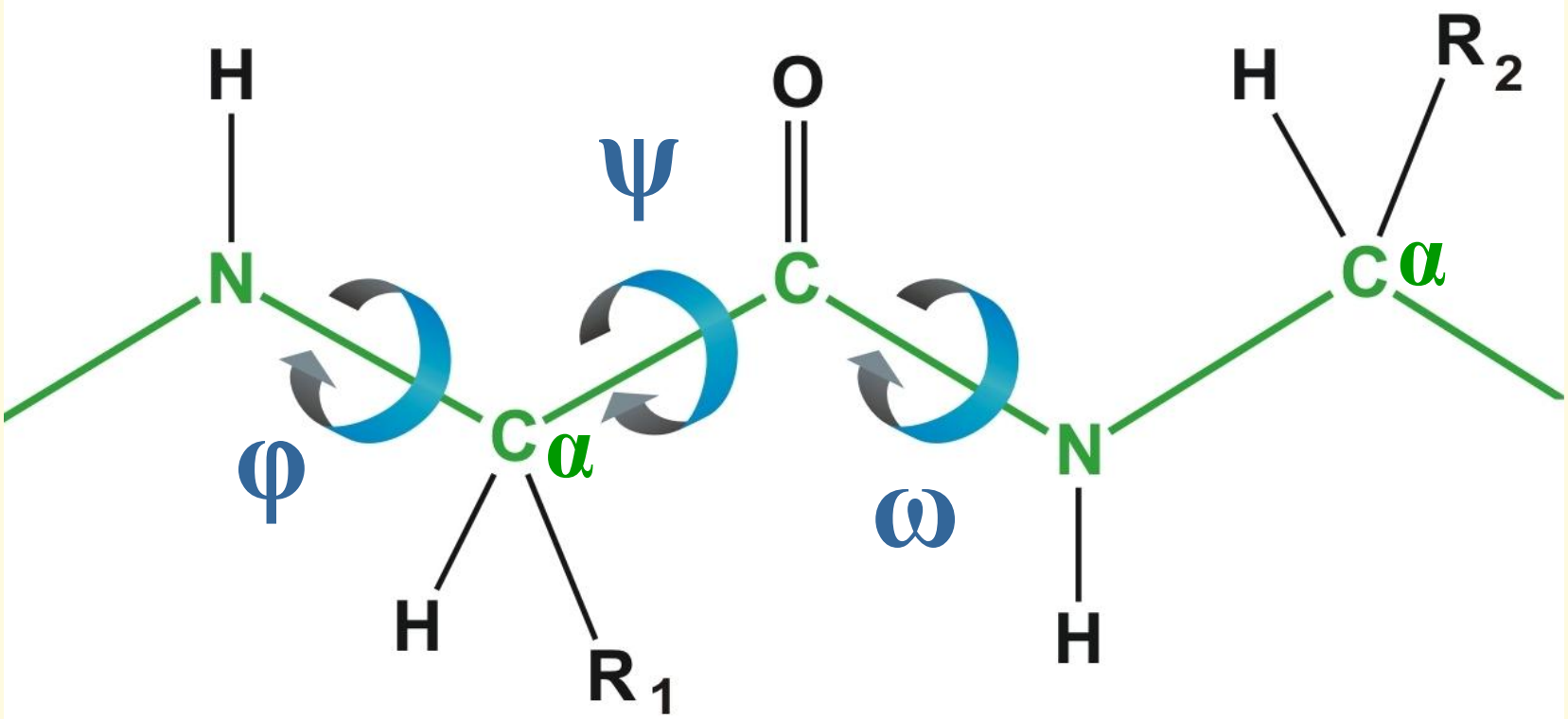


# Пептидная связь

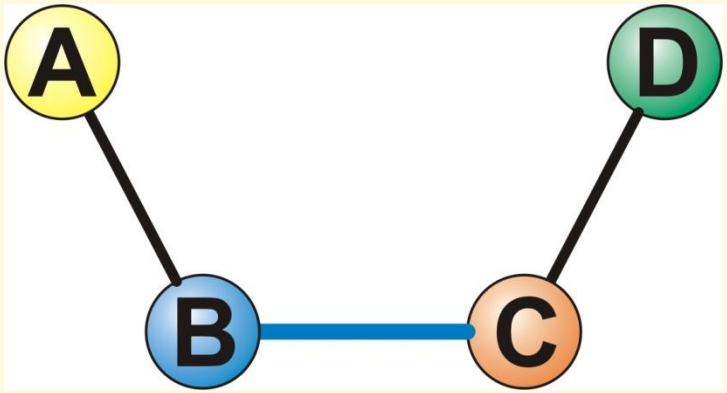


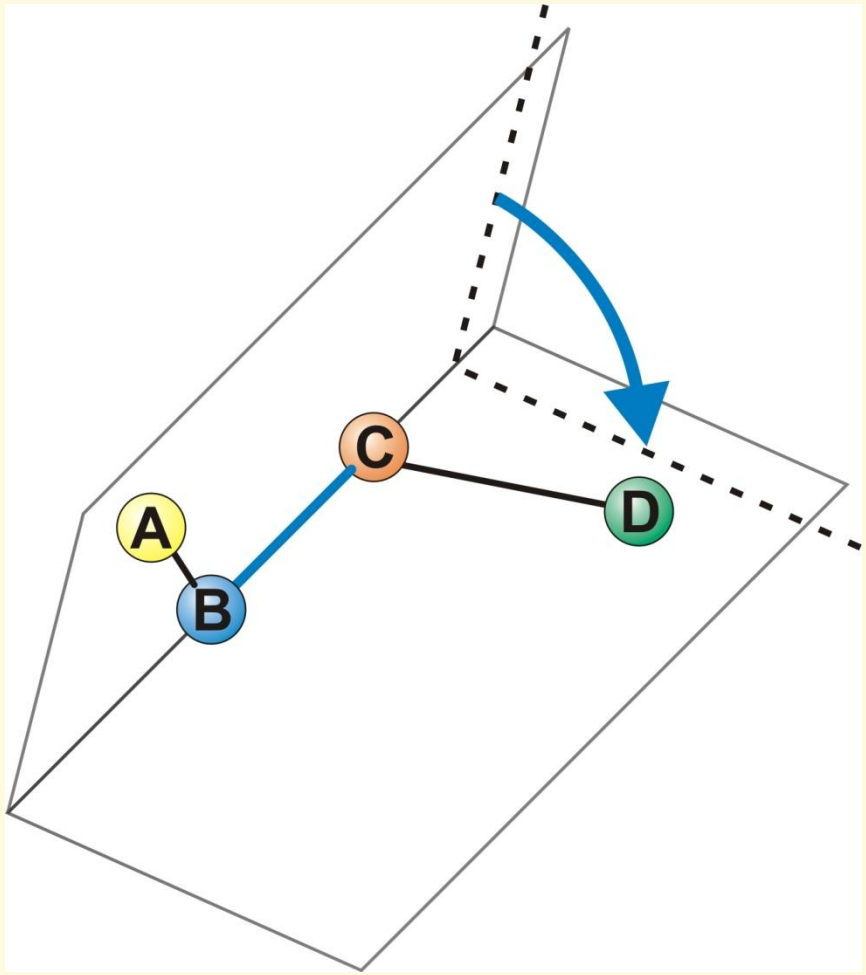

- Пептидная связь прочнее, чем другие амиды
- Атомы пептидного звена ( Cα-C-N- Cα) лежат в одной плоскости
- Валентные углы у атомов C и N примерно равны 120°
- Вращение вокруг связи C-N затруднено
- Возможны *cis*- и *trans*-конфигурации; в белках преобладают *trans*
- Карбонильный кислород – хороший акцептор водорода, а амидный азот – хороший донор водорода

# Вращения вокруг связей в остове белка



# Двугранные (торсионные) углы

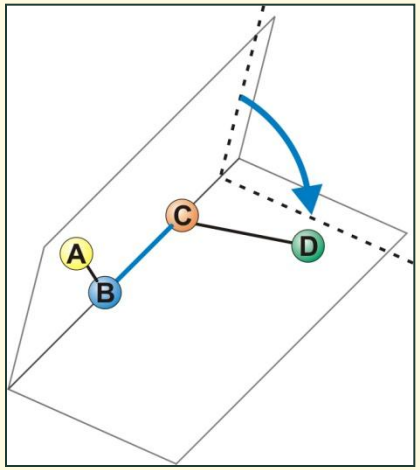


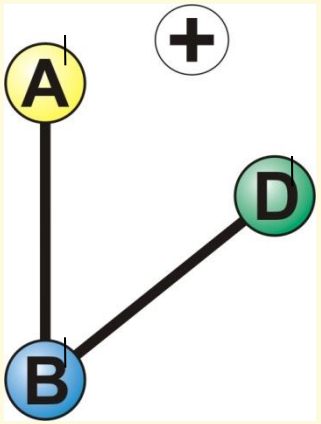



# Двугранные (торсионные углы)

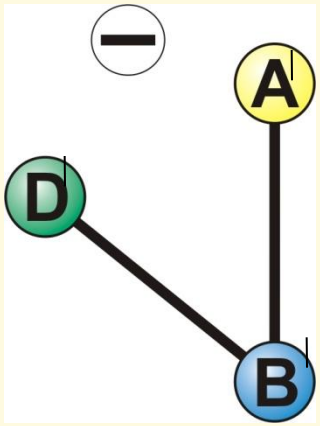
❖ Могут принимать значения от $-180^0$ до $+180^0$

Построим проекции всех связей на плоскость, перпендикулярную связи B-C



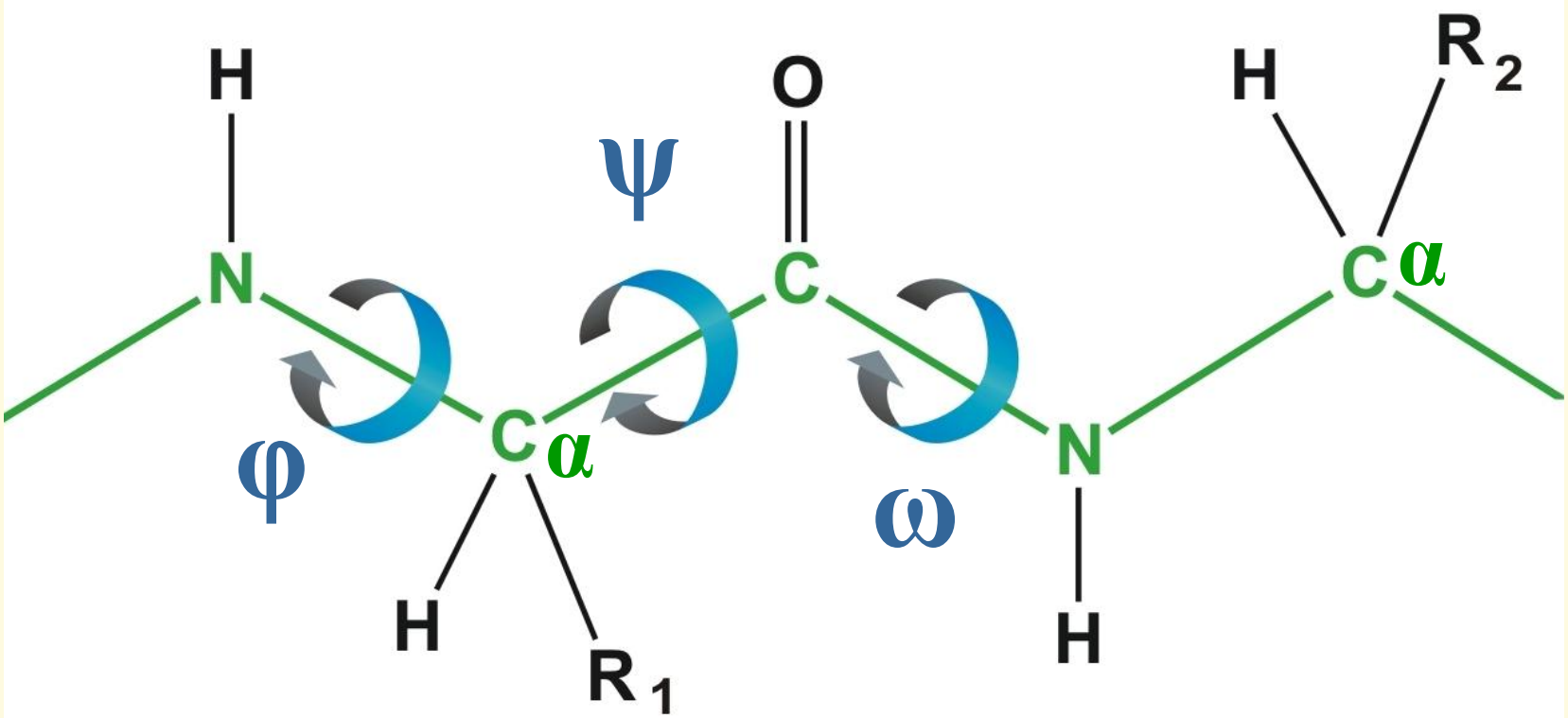




B′D′ совмещается с B′A′ поворотом **<u>против</u>** часовой стрелки




B′D′ совмещается с B′A′ поворотом **<u>по</u>** часовой стрелке

# Вращения вокруг связей в остове белка



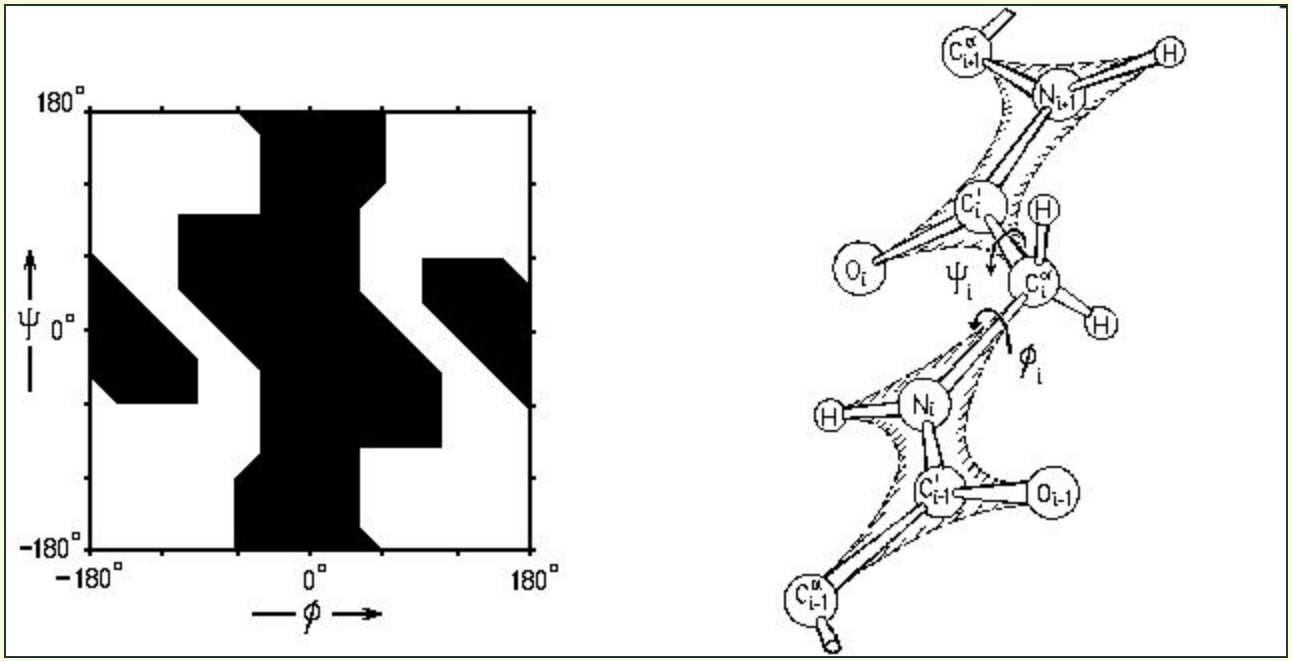

φ
ψ ] теоретически: от –180$^{O}$ до +180$^{O}$

**ω -**

?

# Карта Рамачандрана:

**даже в полиглициновой цепи существуют стерические ограничения**




Карта запрещенных ) конформаций глицина

# Уровни организации структуры белка

1. Первичная структура
2. Вторичная структура
3. Укладка (fold)
4. Третичная структура
5. Четвертичная структура

# Первичная структура

Первичная структура –

это аминокислотная

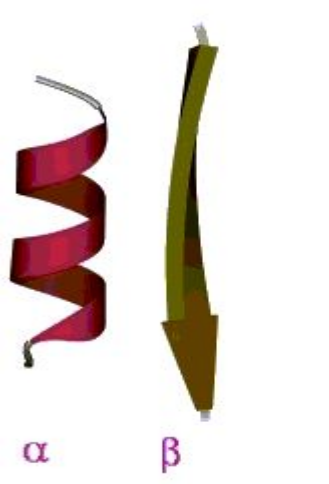
последовательность:

Met-Ala-Gly-Trp-Ala-Val-Asp……..

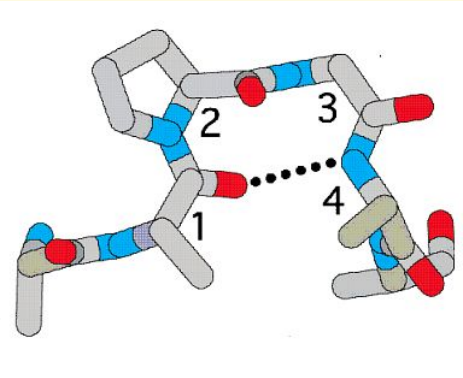
# Вторичная структура

**<u>Вторичная структура белка</u>** – это упорядоченные расположения атомов основной цепи полипептида, безотносительно к типам боковых цепей (групп) и их конформациям.

Если упорядоченность такова, что двугранные углы одинаковы у всех остатков, то говорят о регулярной вторичной структуре. Регулярными вторичными структурами являются спирали и β– структуры.




Пример нерегулярной вторичной структуры – β–поворот (β–изгиб, реверсивный поворот).

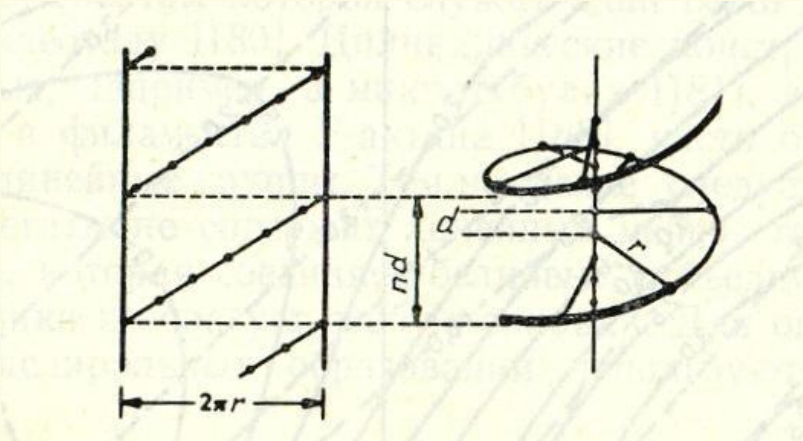


# Вторичная структура

Любую регулярную структуру можно представить в виде линейной группы, т.е. спирали.

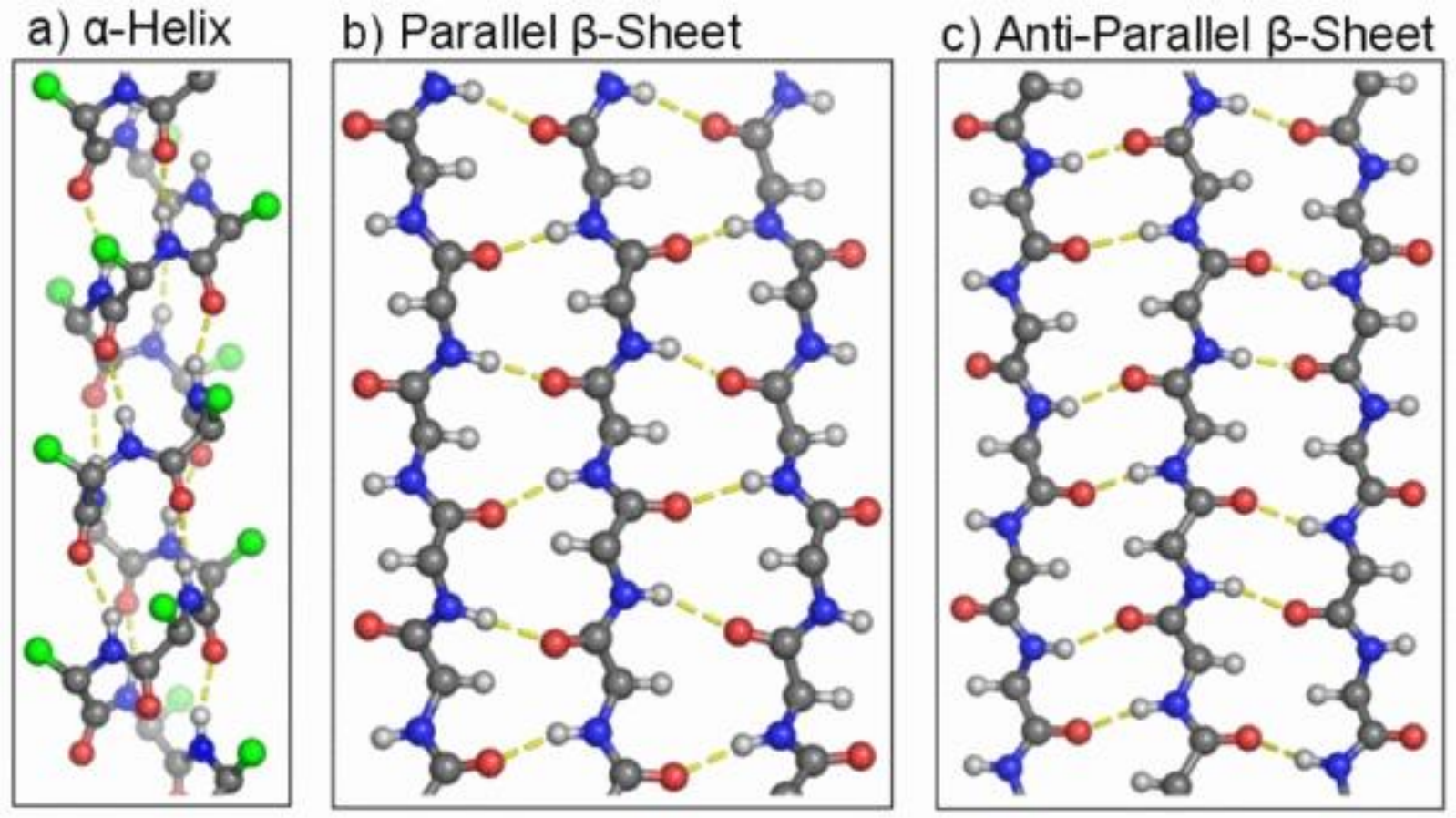
Спираль можно описать с помощью следующих параметров:

**d –** смещение вдоль оси, в расчете на 1 элемент (атом Cα),
**r** – расстояние от Cα–атома до оси,
**n** – число элементов на один виток спирали, хиральность (направление закрутки) определяется знаком , «+» - правозакрученные структуры, «-» – левозакрученные.
/Г.Шульц, Р.Ширмер «Принципы структурной организации белков»/




Спираль, параметры спирали и развертка поверхности спирали.
$n$ — число остатков на виток, $d$ — аксиальное смещение на остаток, $nd$ — шаг спирали, $r$ — радиус спирали. Для получения развертки поверхности спираль проецируют на коаксиально расположенный цилиндрический лист бумаги, этот лист разрезают параллельно оси спирали и затем разворачивают. Развертку поверхности называют также цилиндрической диаграммой. Она делает наглядными геометрические соотношения между остатками. Изменение лицевой стороны обрезанного листа ведет к зеркальному изображению той же цилиндрической диаграммы.

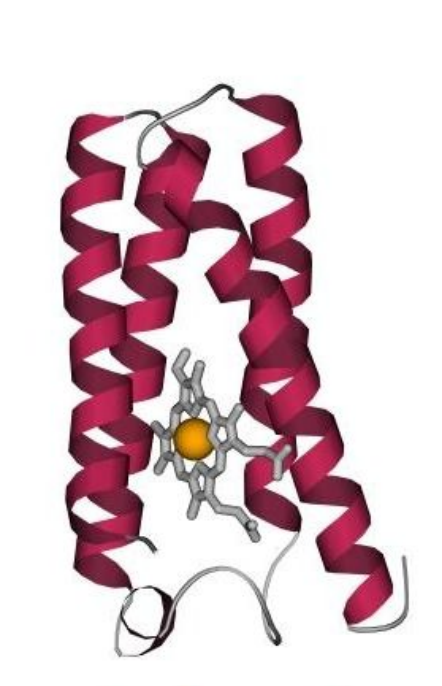
# Регулярные вторичные структуры

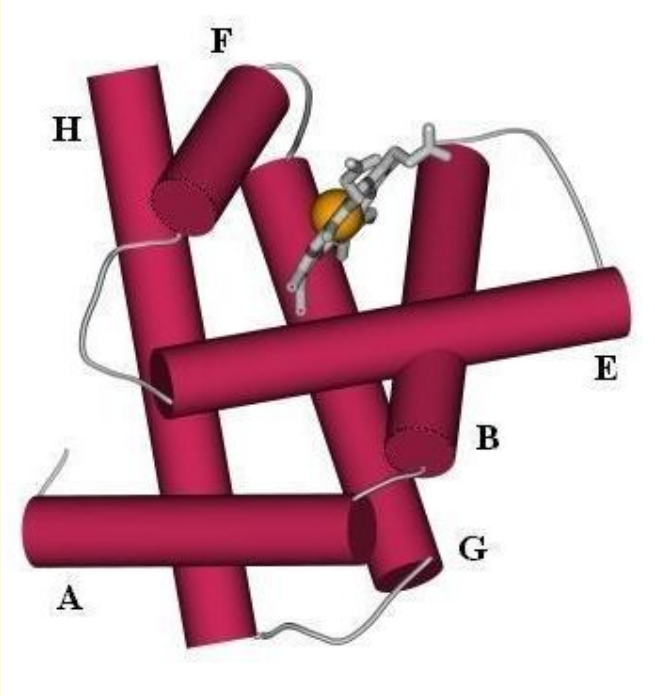


# Укладка (fold)

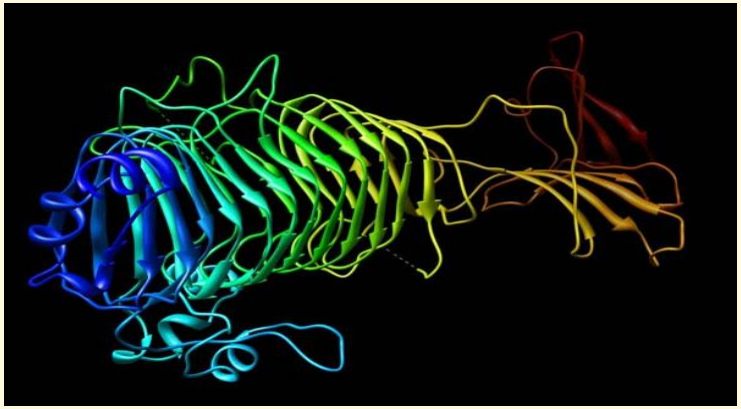
Укладкой называют организацию в пространстве элементов регулярной вторичной структуры

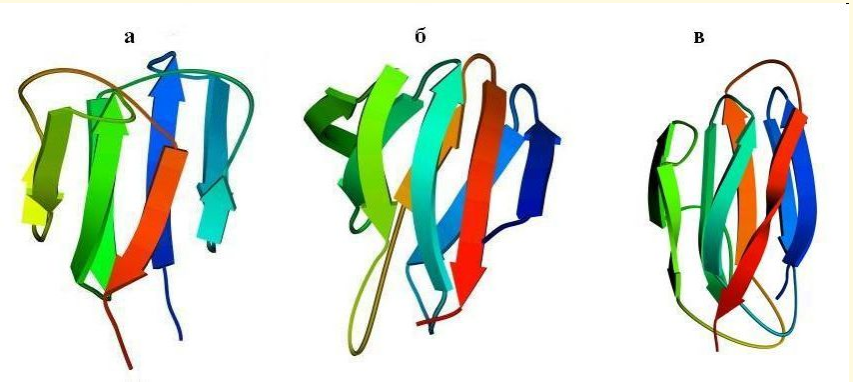
α-спиральные белки

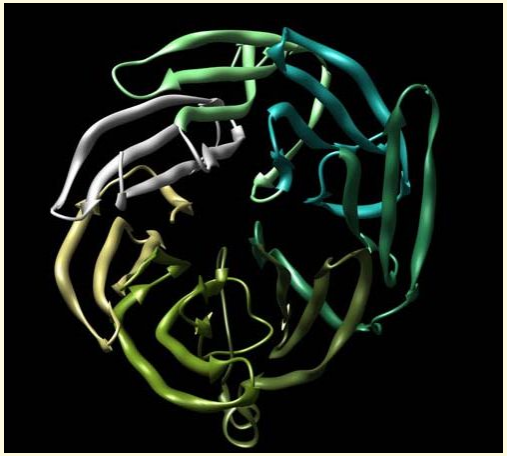


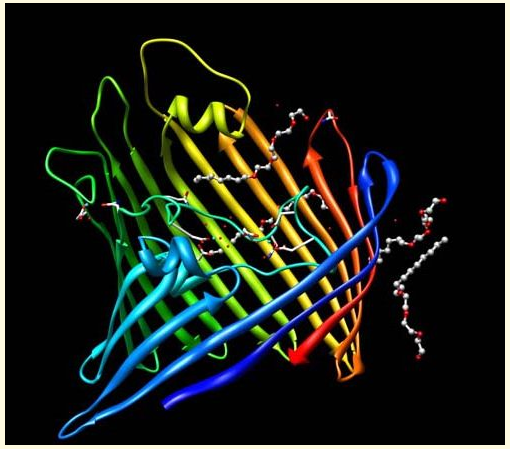


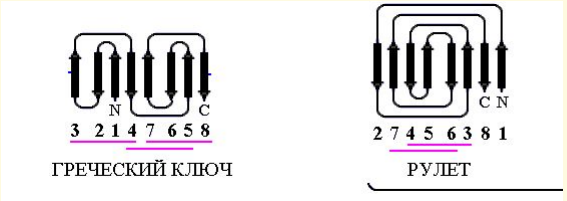
# β-структурные белки



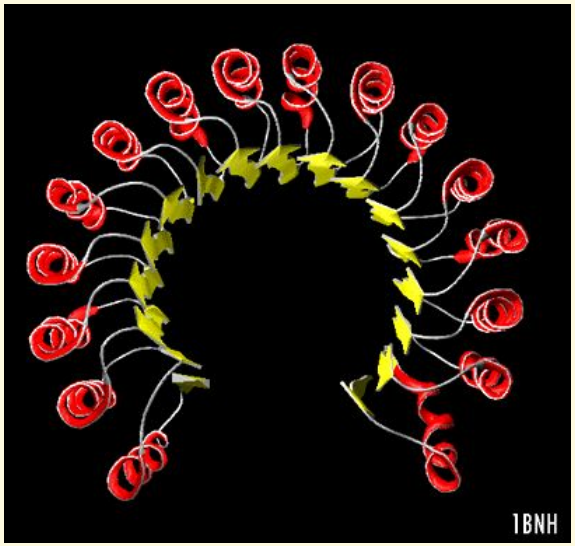


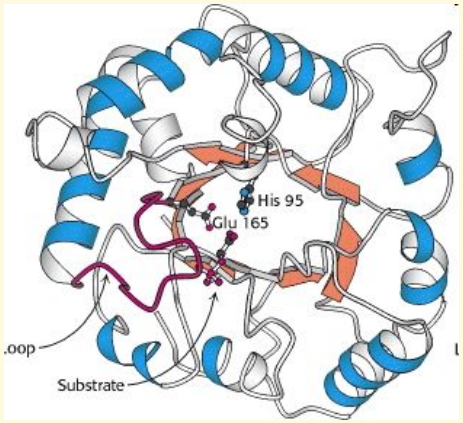



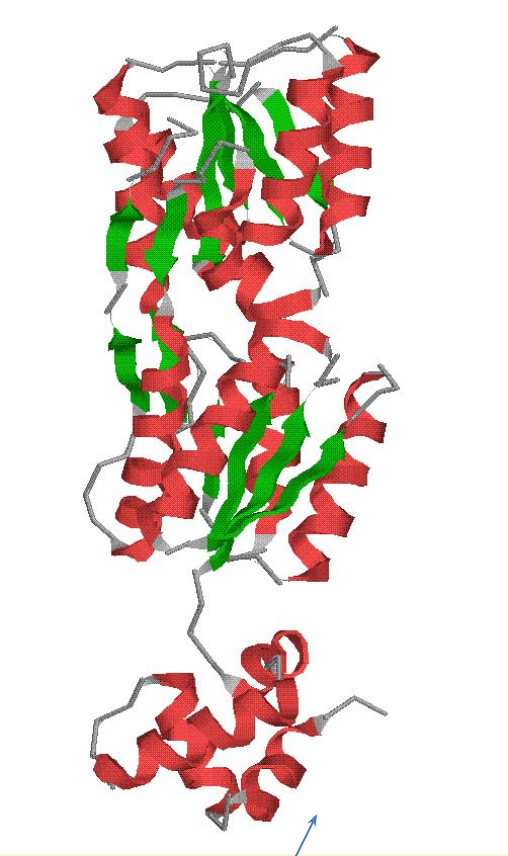




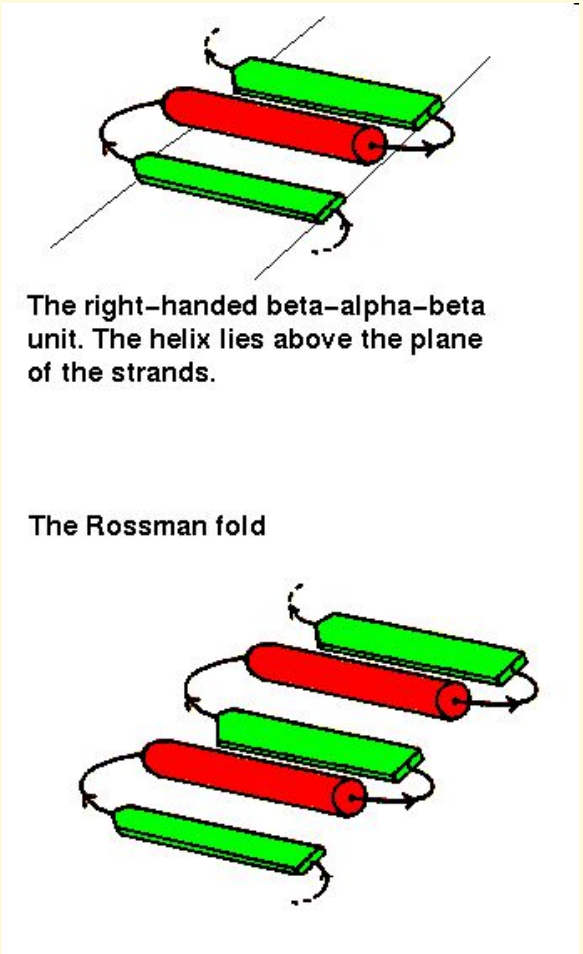
# α/β-белки

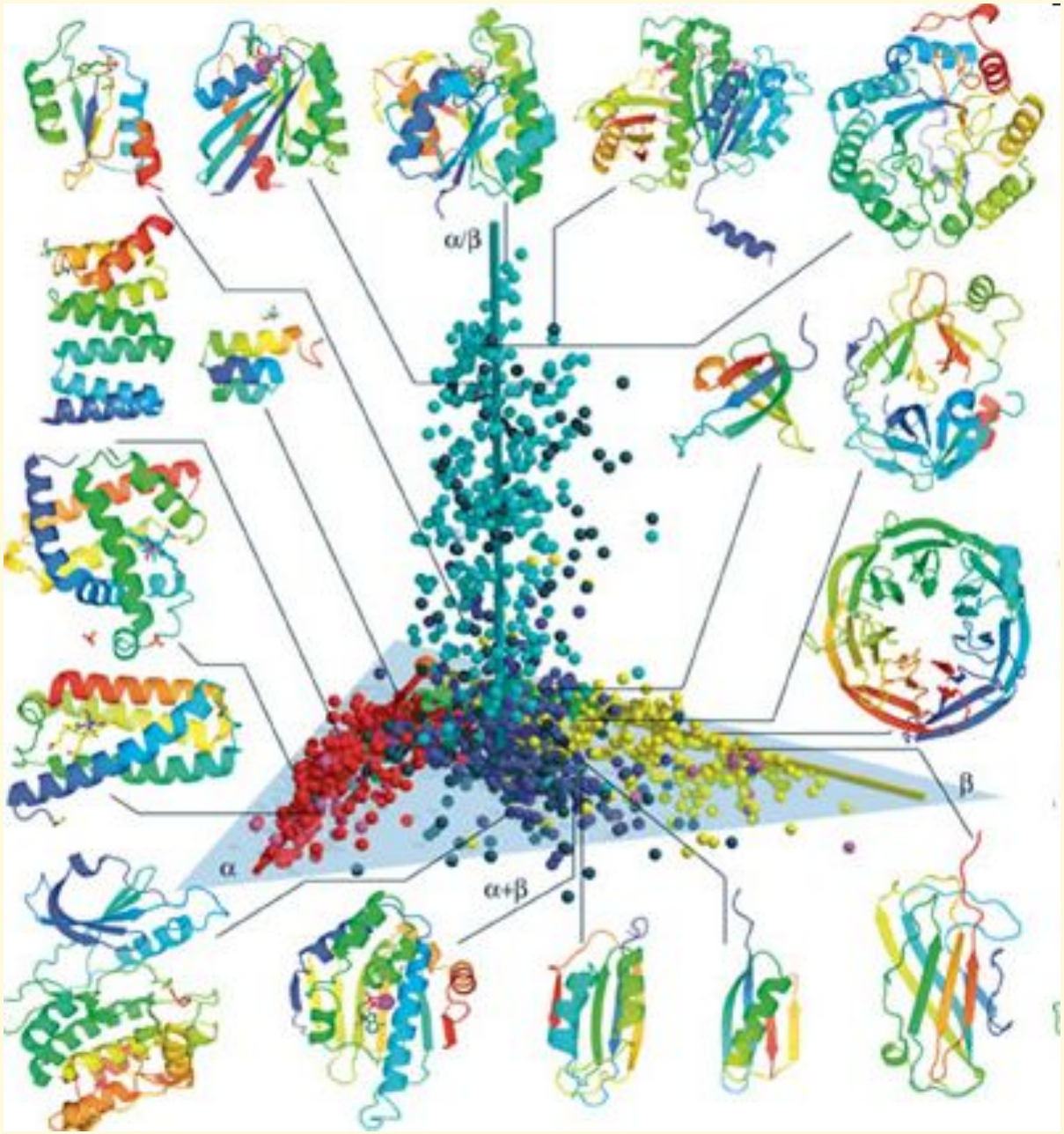


Пример белка с двумя разными структурными доменами




α/β
α
α+β
β

# Третичная структура

Третичной структурой называют расположение в пространстве всех атомов одной полипептидной цепи.

Т.о. описание третичной структуры включает в себя

- описание элементов вторичной структуры,
- описание типа укладки,
- описание структуры петель,
- описание конформаций боковых групп всех аминокислотных остатков.

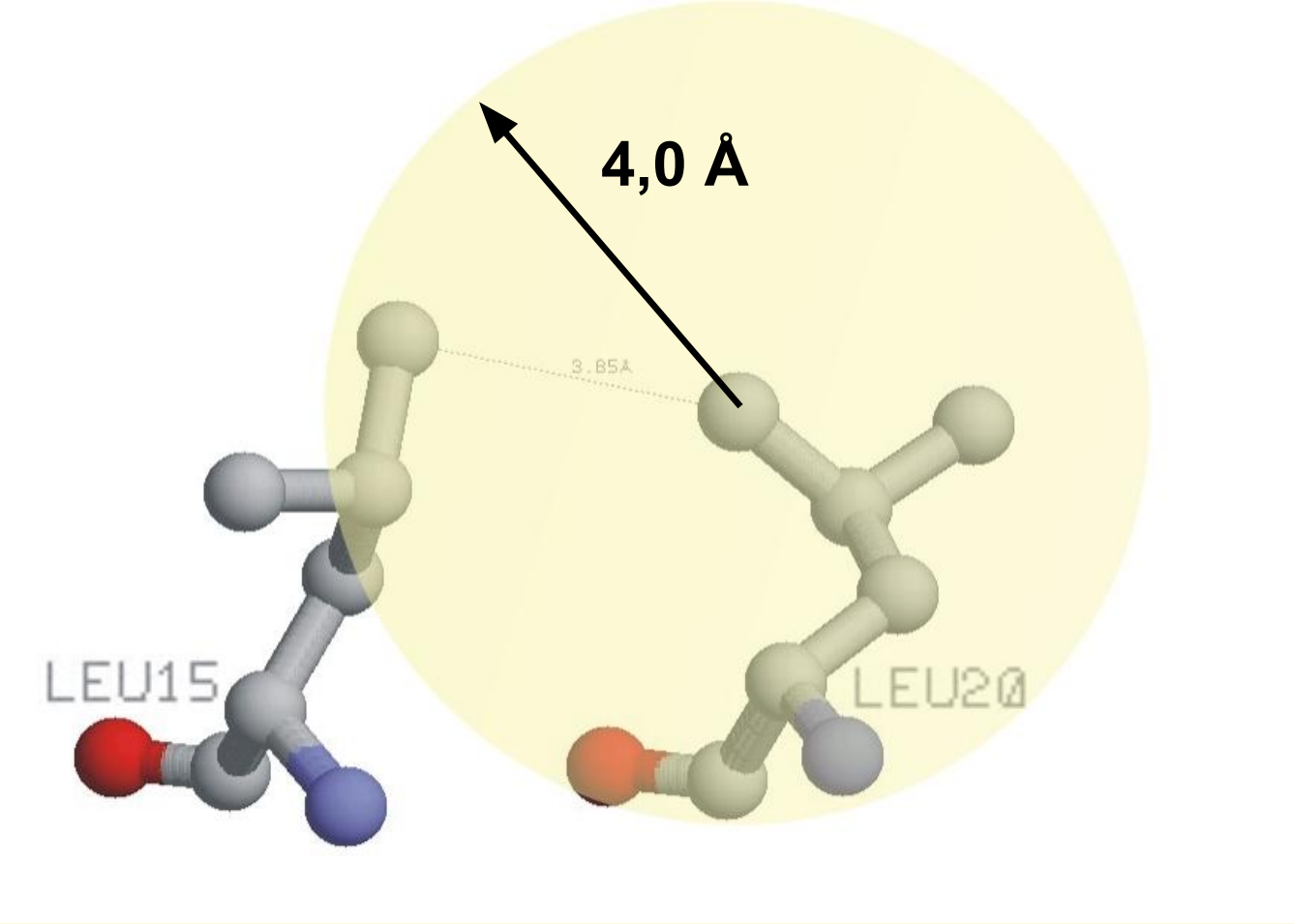
# Третичная структура

Третичной структурой называют расположение в пространстве всех атомов одной полипептидной цепи.

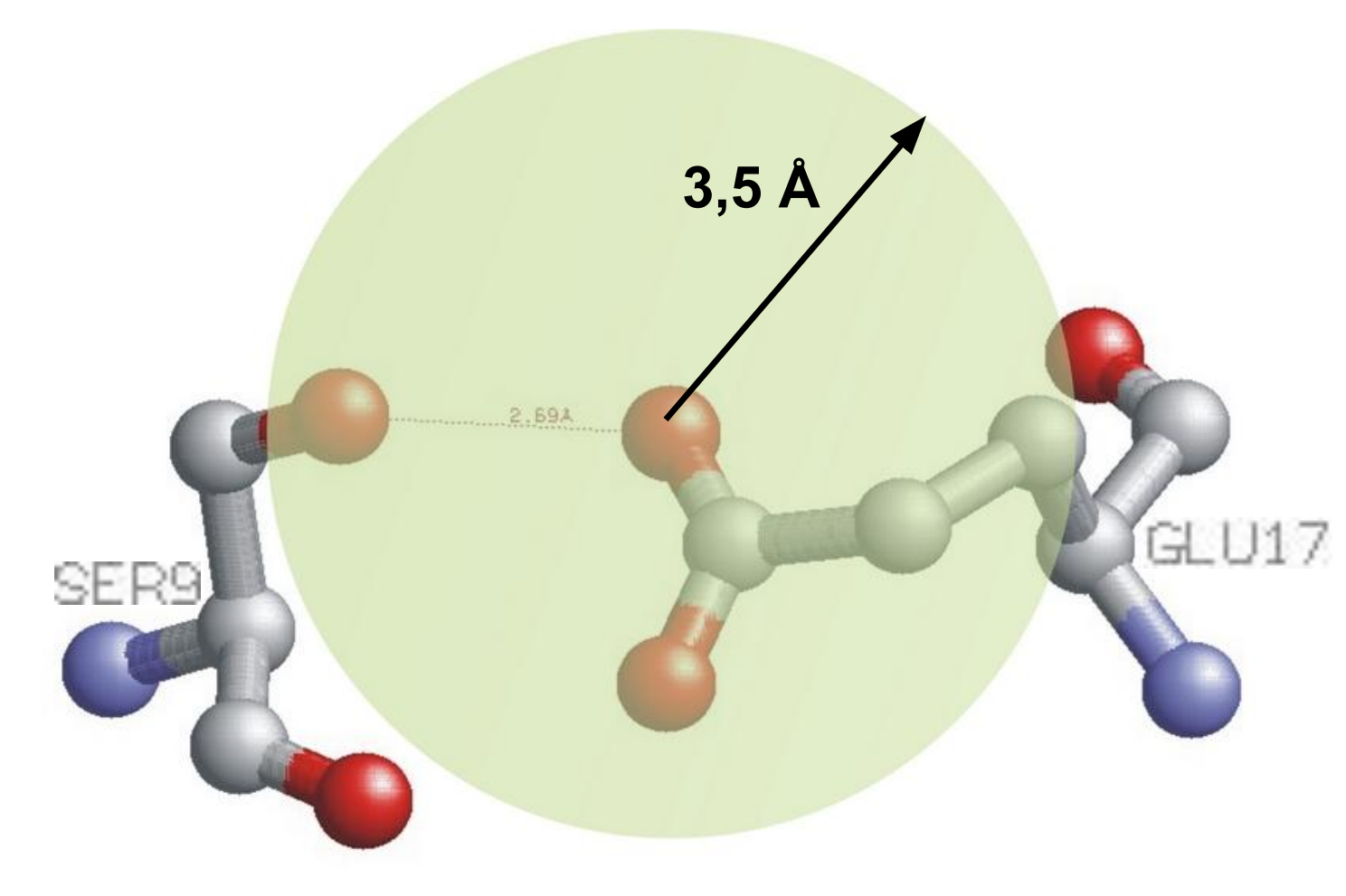
Т.о. описание третичной структуры включает в себя

- описание элементов вторичной структуры,
- описание типа укладки,
- описание структуры петель,
- описание конформаций боковых групп всех аминокислотных остатков.

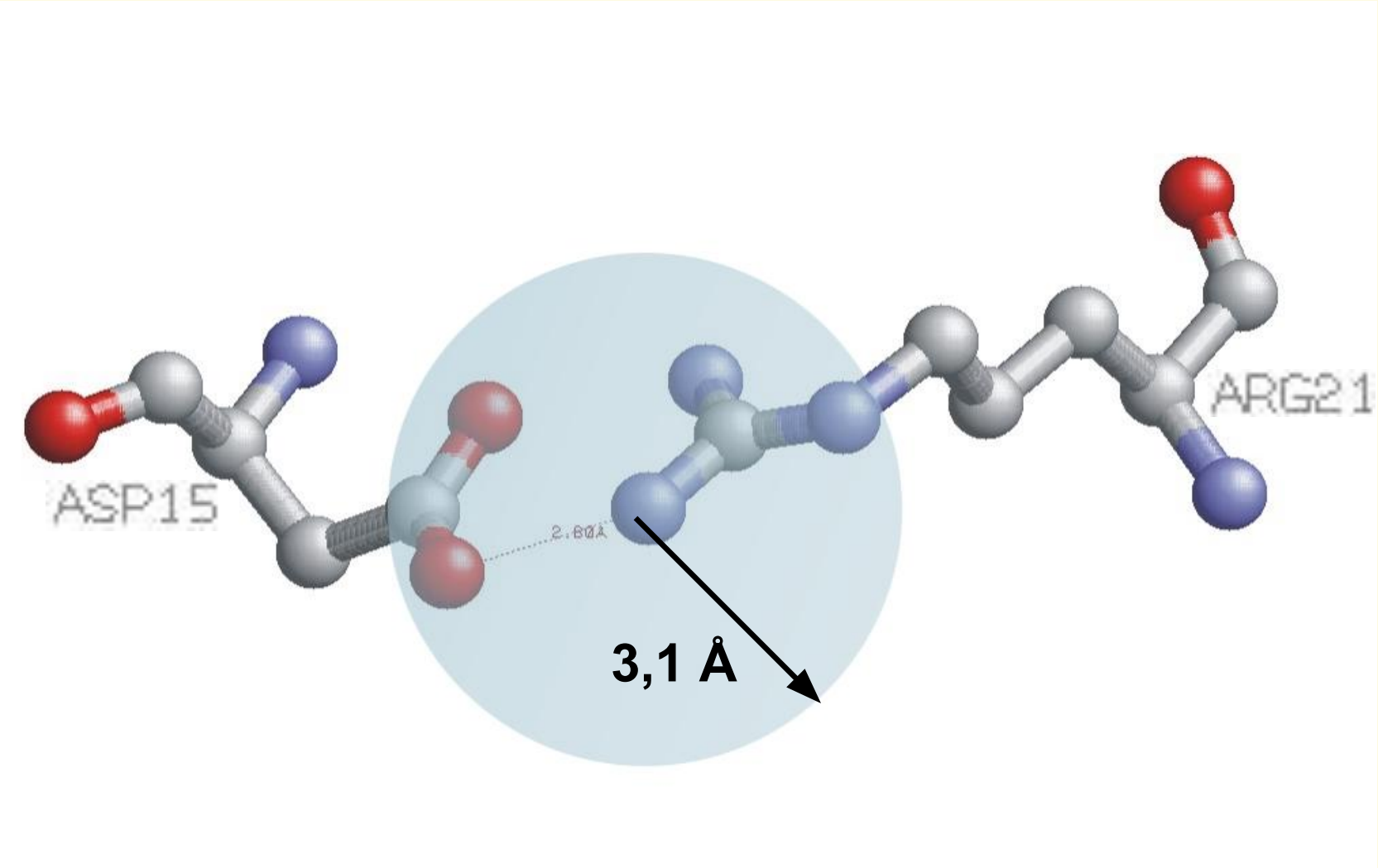
# Гидрофобные взаимодействия – главный фактор, заставляющий глобулу свертываться



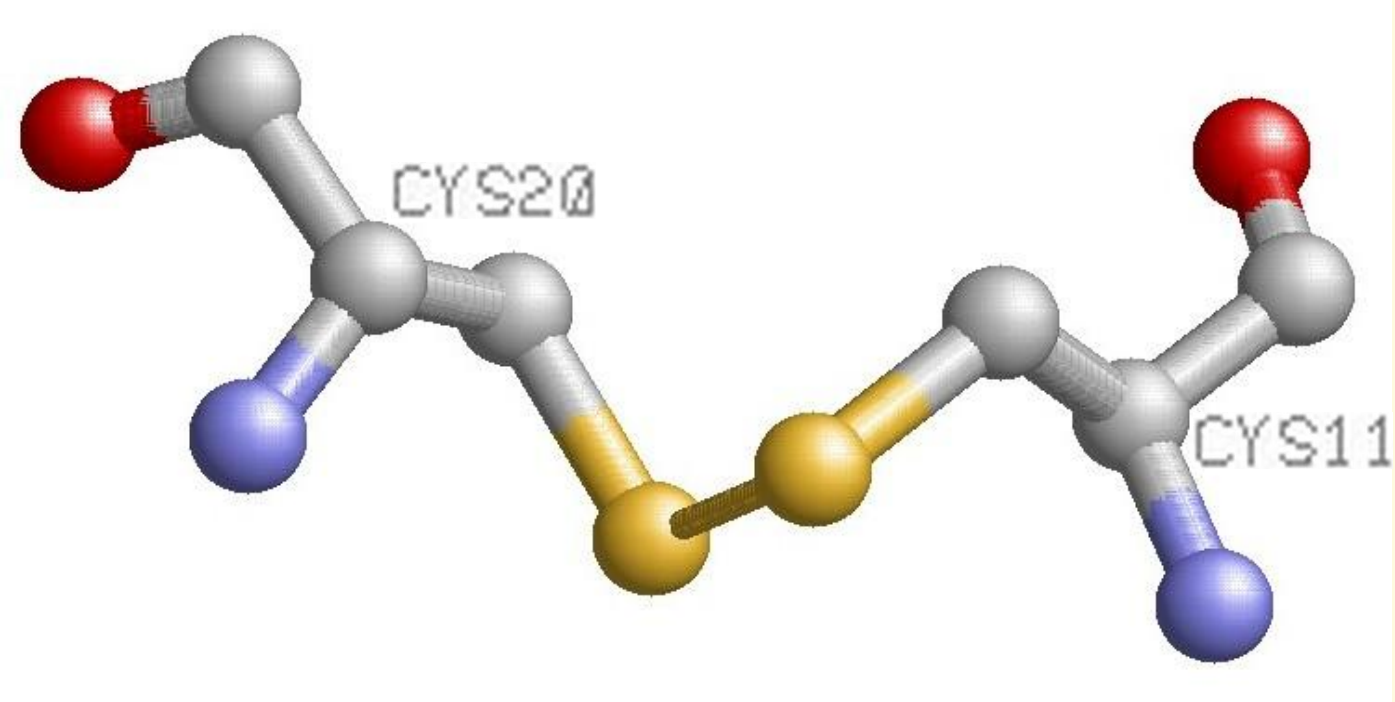
# Вспомогательные взаимодействия: водородные связи



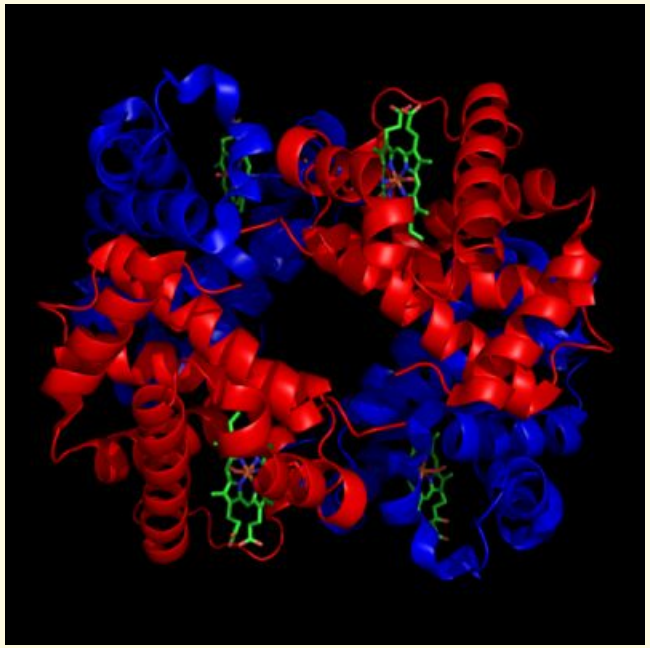
# Ионные пары

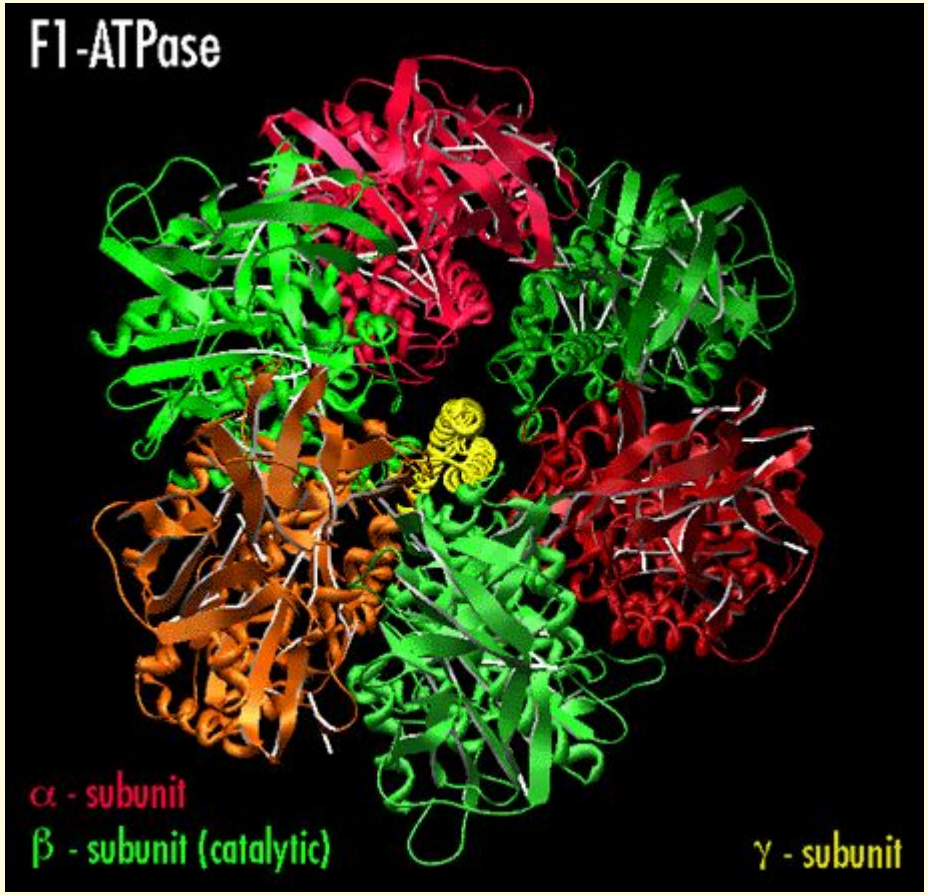


# Дисульфидные мостики характерны для секретируемых белков



# От четвертичной структуры к молекулярным машинам





# От четвертичной структуры к молекулярным машинам