

# Bioinformatika III

## Trimačių struktūrų analizė ir spėjimas

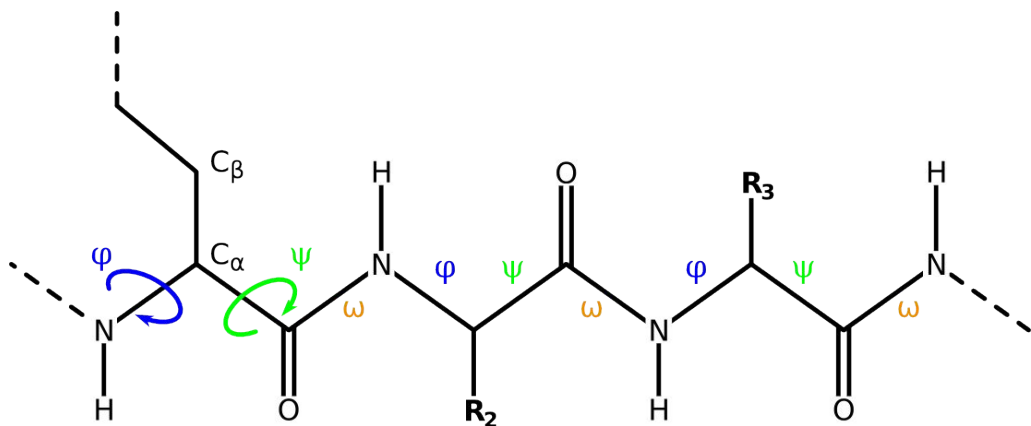
Paskaita 5 – baltymo molekulės geometrija

Saulius Gražulis  
2011 m.

# Polipeptidīnēs grandīnēs struktūra

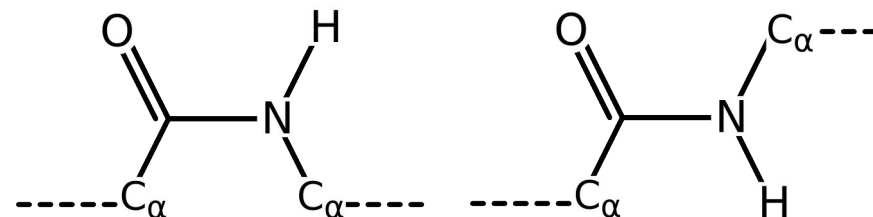
Polipeptidīnē grandīnē

1:1000

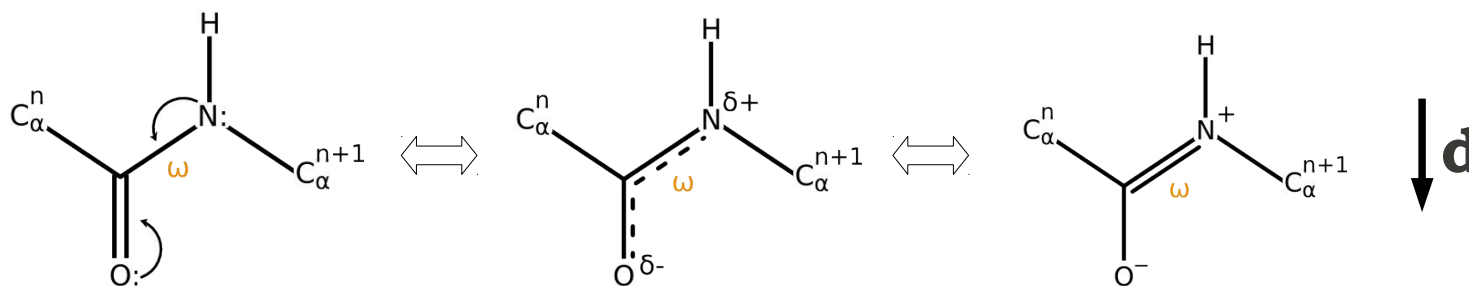


cis  
( $\omega = 0^\circ$ )

trans  
( $\omega = 180^\circ$ )



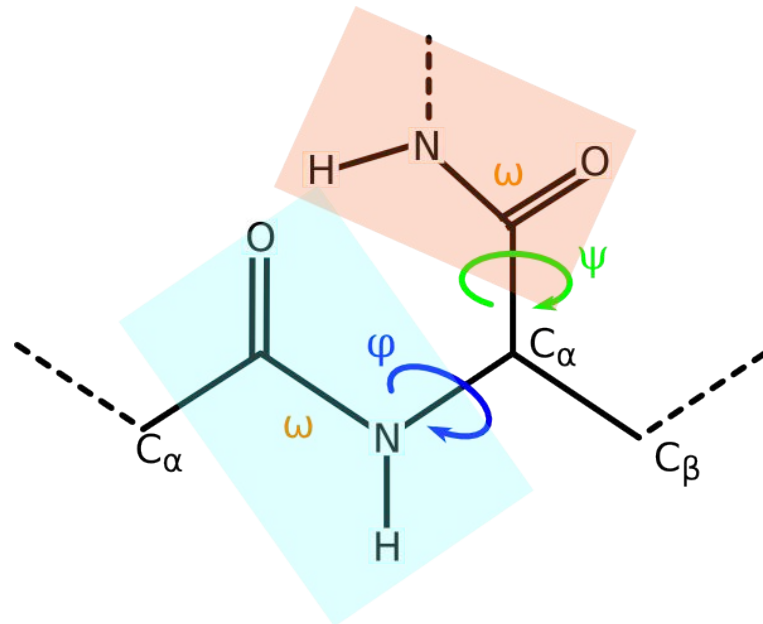
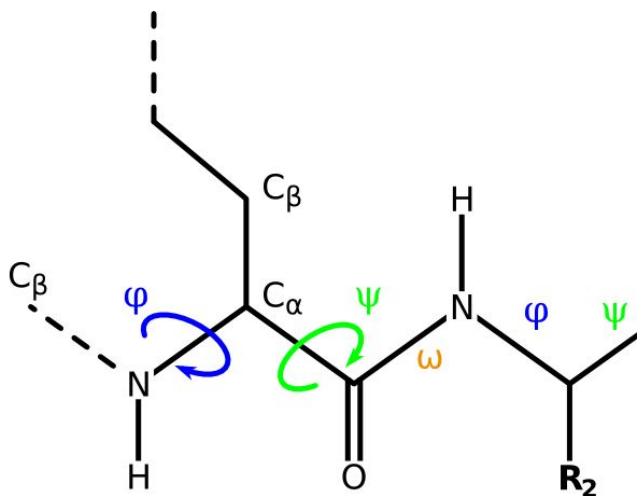
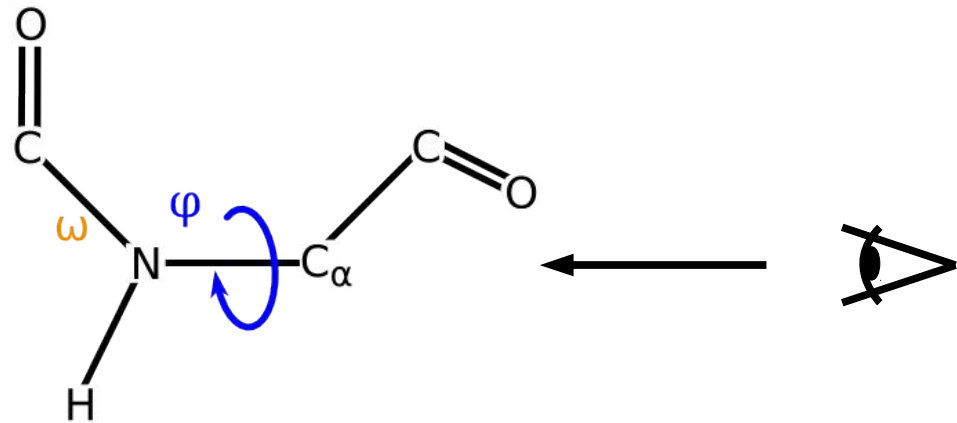
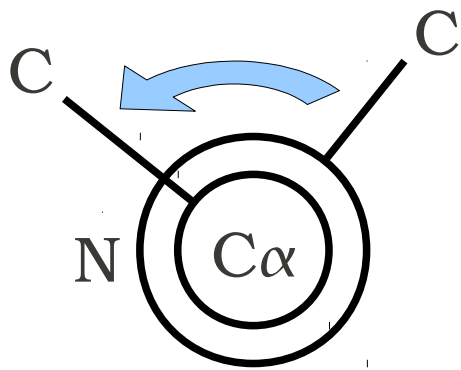
Wikipedia: [Peptide\\_bond](#) (2008.10.27 18:33)



Lehninger 1998, II leidimas,  
182 ps. (vok. k.)

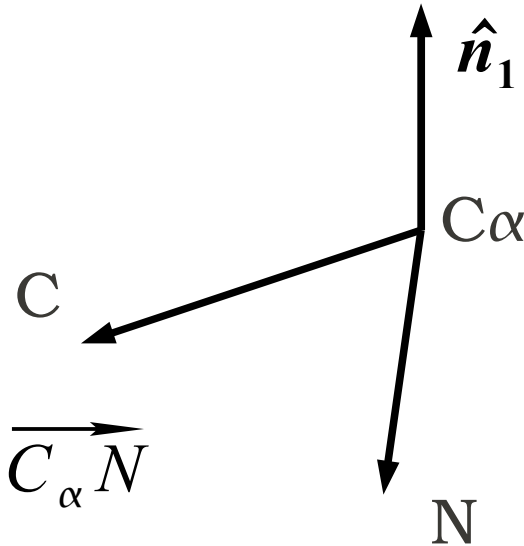
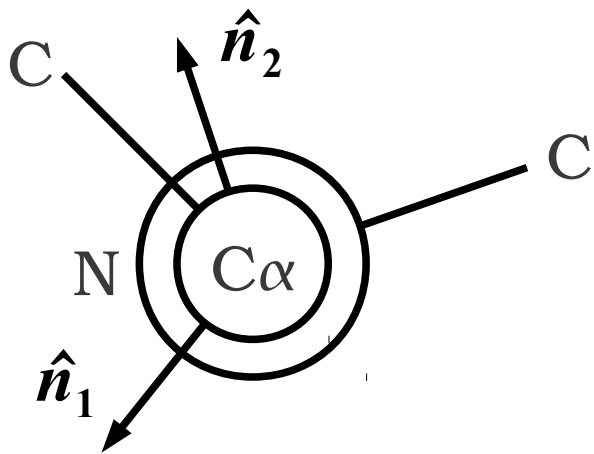
Linus Pauling & Corey, 193x (30-ji metai);  
Rentgenostruktūrinēs analizēs duomenys

# Kampų $\varphi$ ir $\psi$ atskaitos pradžia bei kryptis



# $\varphi$ ir $\psi$ kampų skaičiavimas

Plokštumos normalė:



$$\vec{n}_1 = \overrightarrow{C_\alpha C} \times \overrightarrow{C_\alpha N}$$

$$\hat{n}_1 = \frac{\overrightarrow{C_\alpha C} \times \overrightarrow{C_\alpha N}}{|\overrightarrow{C_\alpha C} \times \overrightarrow{C_\alpha N}|}$$

Kampas tarp plokštumų:

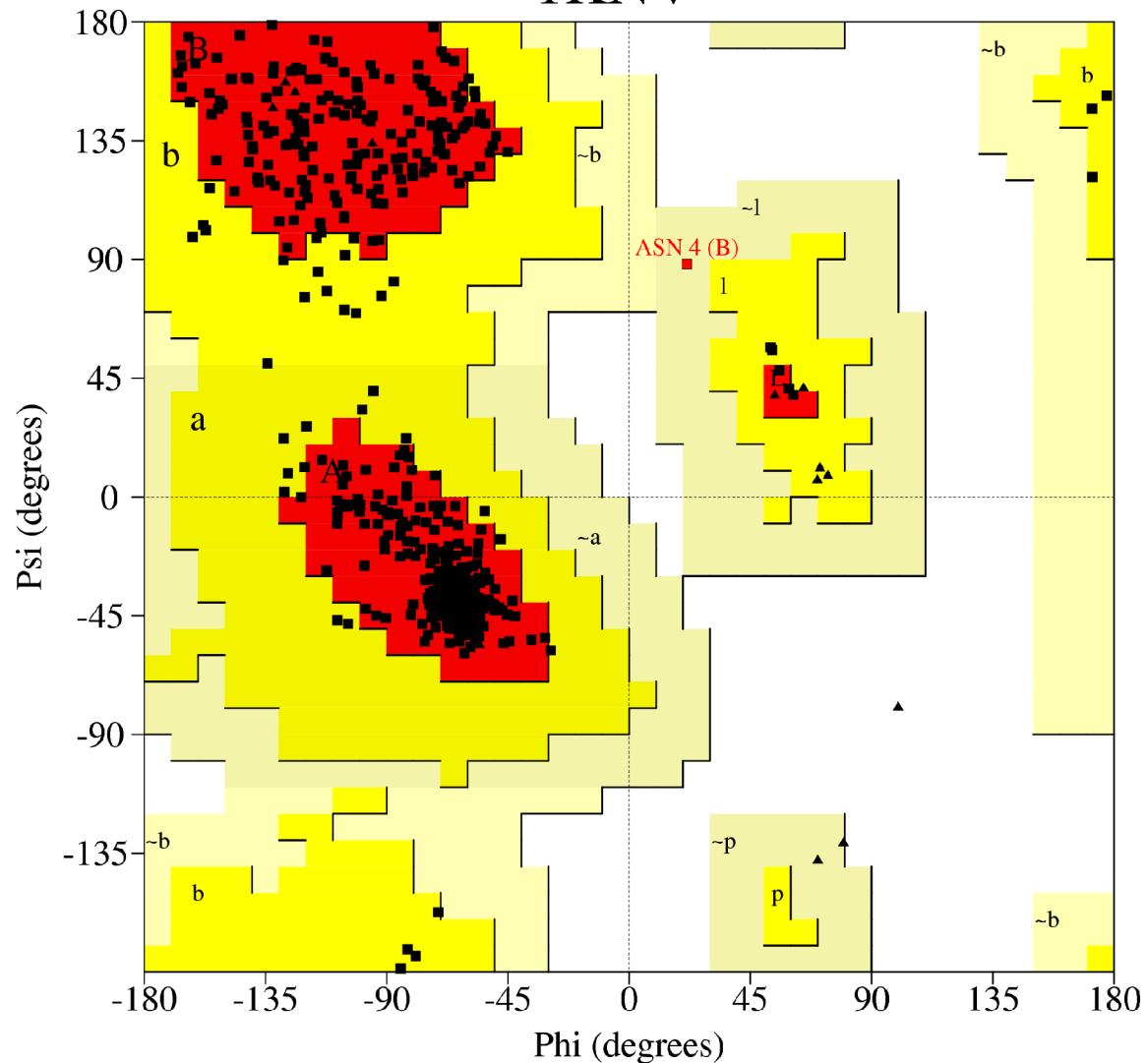
$$\cos \varphi = (\hat{n}_1 \cdot \hat{n}_2) = \frac{(\vec{n}_1 \cdot \vec{n}_2)}{|\vec{n}_1| |\vec{n}_2|}$$

$$\text{sign } \varphi = \text{sign}([\hat{n}_1 \times \hat{n}_2] \cdot \overrightarrow{C_\alpha C})$$

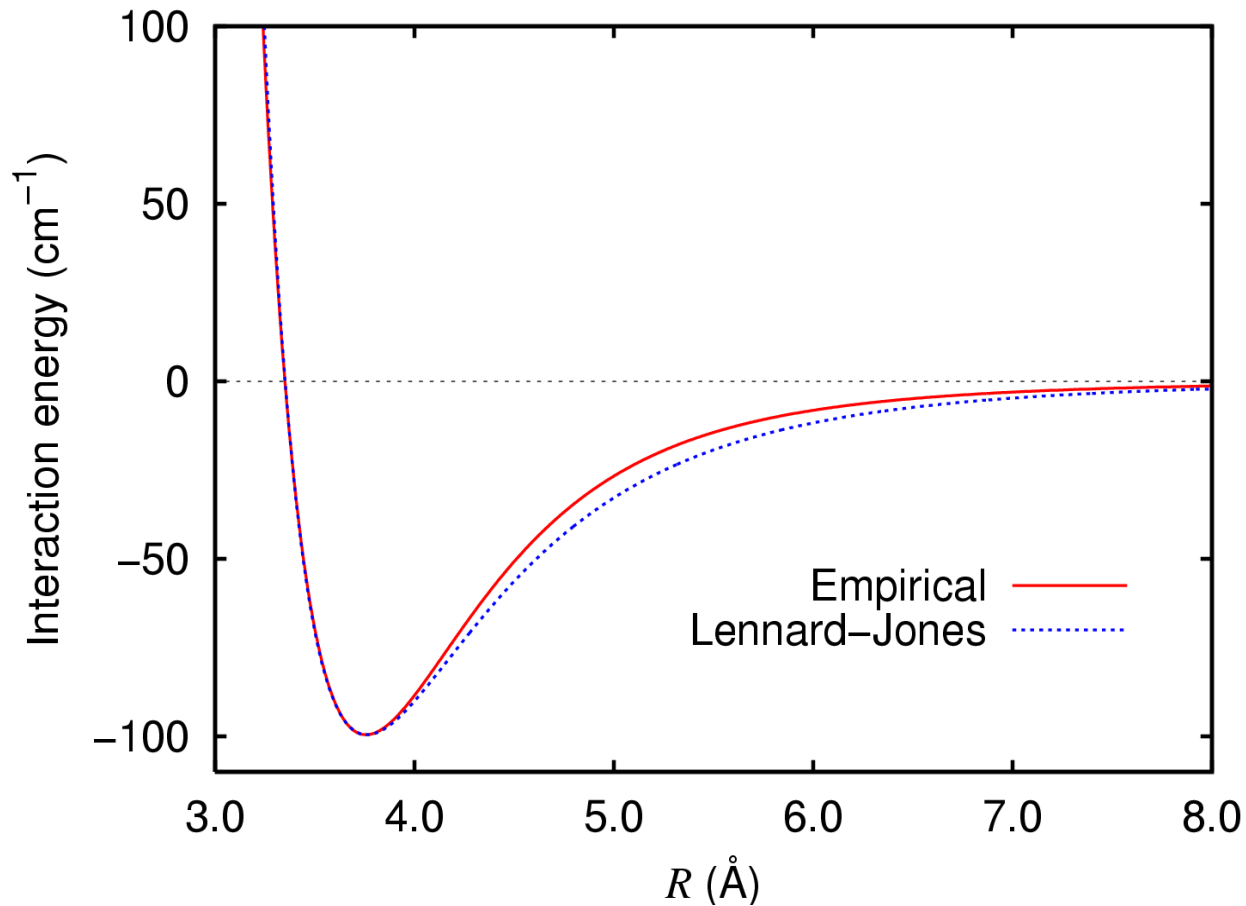
# Ramačandrano diagrama

FRUHECK

## Ramachandran Plot 1KNV



# Lenardo-Džonso potencialai (Lennard-Jones potential)



$$V(r) = 4\epsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 \right]$$

# Amino rūgščių tipai

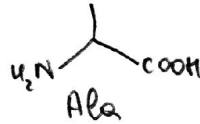
## Amino rūgščių klasifikacija

1. Glicinas



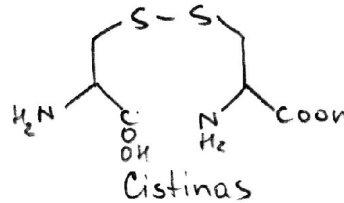
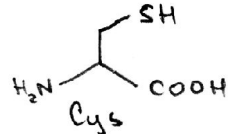
Mažiausia a.r.; dėl mažų sterinių trukdžių gali užimti nebūdingas kitoms a.r.  $\phi/\psi$  konformacijos. Dažnai sutinkamos posūkiuose.

2. Mažos hidrofobinės



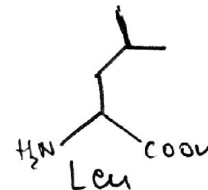
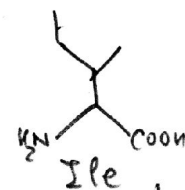
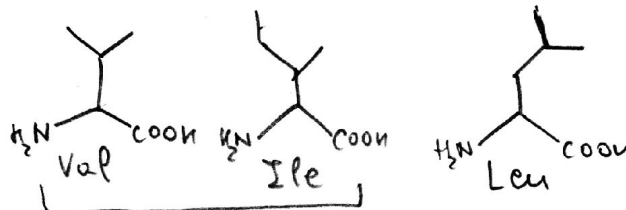
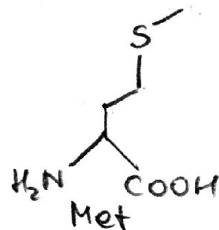
Retai dalyvauja katalizėje. Gali būti ekspanuoti paviršiuje. "Gerai tinka" laikinos balt. svėikos paviršiams.

3. Cisteinas



Cys sudaro kovalentinius S-S tiltelius. Koordinuoja metalus.

4. Vidutinės hidrofobinės

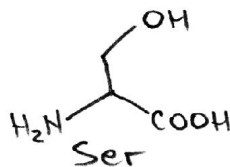


$\beta$ -šakotos

Retai dalyvauja katalizėje. Retai būna paviršiuje, dažniau - hidrofobiniuose baltymo branduoliuose.

Dėl  $\beta$ -išsiskojimo retai sutinkamos  $\alpha$ -spiralese, dažniau -  $\beta$ -lakštuose.

5. Serinas - maža polinė



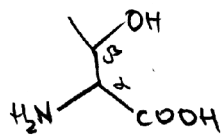
Sutinkama tiek baltymų viduje, tiek išorėje. Neretai pasitaiko "standžiose" kilpose, nes gali sudaryti H-jungtis su karkasu. Dalyvauja kat. (nukleofilas) (pvz. Ser proteazėse). Fosforilimo vieta.

# Amino rūgščių tipai (2)

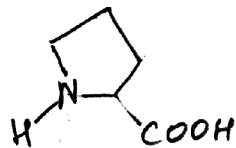
## Amino rūgščių klasifikacija (II)

6. Treoninas

Maža polinė, bet  $\beta$ -šakota

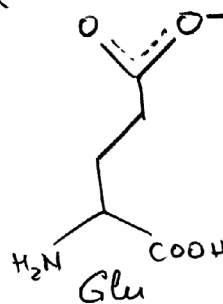
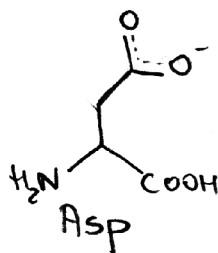


7. Prolinas žiedinė

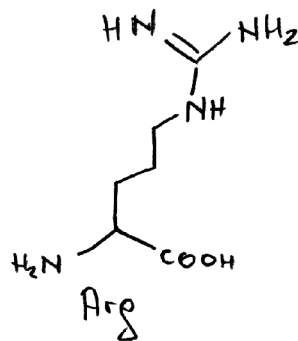
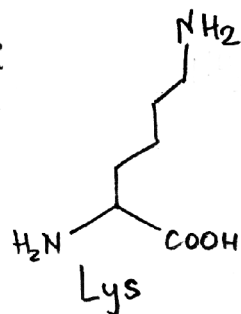


Pro (kartais vadinama imino r.)

8. Neigiamai įkrautos



9. Teigiamai įkrautos



Gali dalyvauti katalizėje  
Gali būti fosforilinta.  
Dėl  $\beta$ -šakos dažniau sutinkama  $\beta$ -lakštuose

Žiedas riboja galimas konformacijas. Dažnai būna cis (1:3)\*

Dažnai būna posūkiuose; "nemėgsta"  $\alpha$  spiralių; spiralių sukalia "lūžį"

Dalyvauja katalizėje (a.c.)

Baltymo viduje sudaro druskų tiltelius.

Dažnai būna baltymo paviršiuje. Koordinuoja metalus (Zn, Ca, Mg)

Dalyvauja surišant DNR.

Gali sudaryti druskos tiltelius.

Šon. Grandinės pradžia hidrofobinė, galas įkrautas.

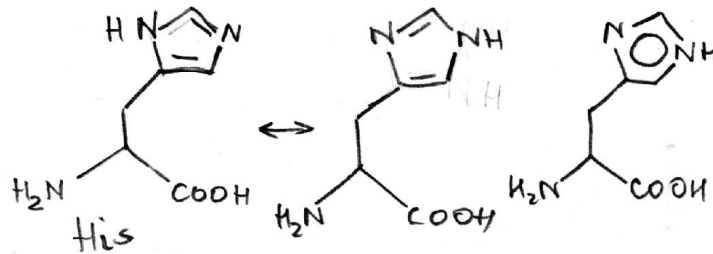
Dažnai sutinkama paviršiuje.



# Amino rūgščių tipai (3)

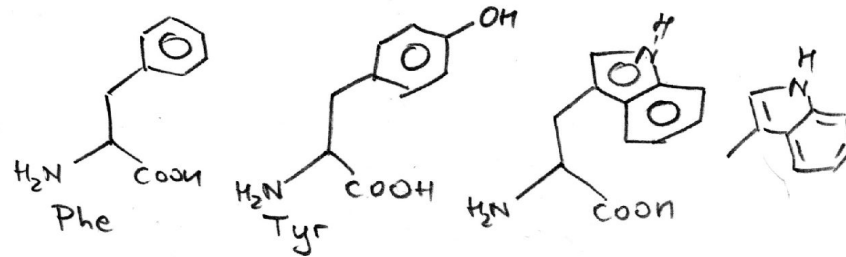
## Amino rūgščių klasifikacija

10. Histidinas



Dalyvauja katalizeje  
koordinuoja metalus

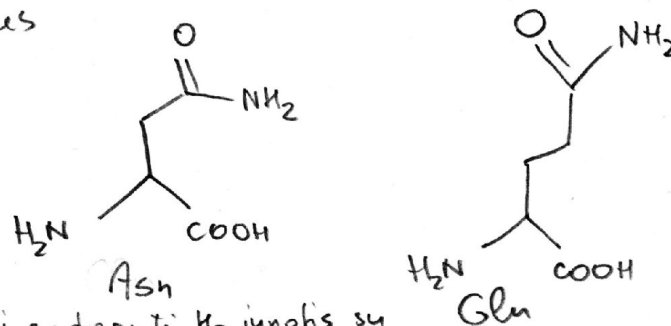
11. Didelis Aromatinės



Phe  
Dažniausiai  
būna balt. viduje  
Sudaro "hidrofobius  
stulpelius".

Tyr gali būti  
fosforilintas

12. Amfoterinės



Gali sudaryti H- jungtis su  
p.p. karkasu, ir užimti nepaprastą  $\alpha/\beta$  konf.  
pozicijoje.

Gali sudaryti  
druskos tilhelius  
Gali koordinuoti  
metalus  
Gali dalyvauti  
katalizeje  
Dažnai būna  
paviršiuje

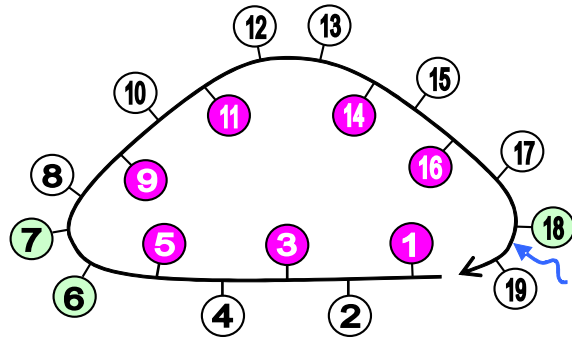
# Panaudojimas struktūros spėjimui

Repeat 1 V N V A G G G A V K I A S A S S V G - N  
 Repeat 2 L A V Q A G G K V Q A T L L N A G G - T  
 Repeat 3 L L V S A R Q S V Q L G A L S A R Q - A  
 Repeat 4 L S V N A G G A L K A D K L S A T G S R

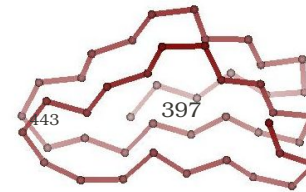
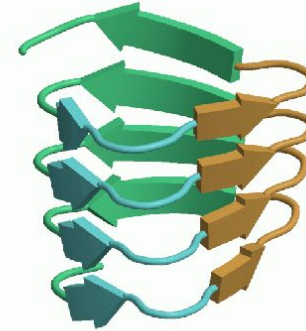
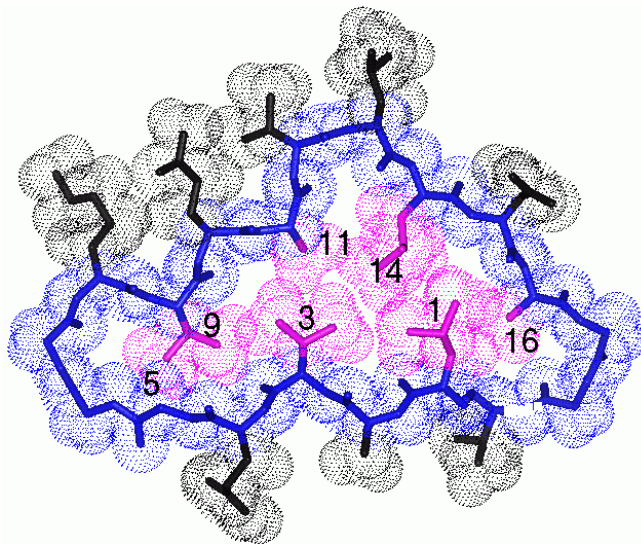
consensus L x V x A G G x V x L x x L x A x G - x

positions 1 3 5 7 9 11 13 15 17 19

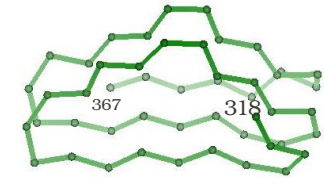
2D plot



3D structure



**Model**  
(Kajava et al., 2001)



**Crystal structure**  
(Clinton et al., 2004)

*RMS deviation of C<sub>α</sub> atoms is 1.1 Å*

Šią skaidrę maloniai pateikė/this slide was kindly provided by:  
 Dr Andrey Kajava  
 Group of Structural Bioinformatics and Molecular Modeling  
 Centre de Recherches de Biochimie Macromoléculaire, CNRS  
 Montpellier, FRANCE

# Programos geometrijai analizuoti

- Geometrinė analizė, Ramačandrano diagrama
  - Procheck, WhatIf, WhatCheck, Coot, Pymol ...
- Antrinės struktūros priskyrimas
  - DSSP, Stride