

Лекция 2: Вторичная структура белков

1 Иерархия структуры белков

Выделяют четыре уровня в иерархии белковых структур. Первичная структура - последовательность аминокислот. Вторичная структура представляет собой локальные конформации полипептидной цепи, такие как α -спирали и β -лучи. Некоторые комбинации вторичных структур иногда также называют вторичной структурой или супервторичной структурой. Примером может служить β -шпилька, которая представляет из себя два β -луча, соединённых коротким разворотом цепи белка. Полную трёхмерную структуру белка называют третичной структурой. Четвертичная структура описывает трёхмерную композицию индивидуальных доменов в больших мультидоменных белках.

2 α -спирали

α -спирали представляют из себя плотные витки вокруг длинной оси молекулы, один виток составляет 3,6 аминокислотных остатка, и шаг спирали составляет 0,54 нм (так что на один аминокислотный остаток приходится 0,15 нм), спираль стабилизирована водородными связями между Н и О пептидных групп, отстоящих друг от друга на 4 звена (Рис. 1). Таким образом, рисунок водородных связей может быть записан как $(i, i + 4)$, т.е. каждая аминокислота связана водородной связью с аминокислотой на 4 впереди по цепи. Кроме стандартной α -спирали, существует ещё два типа спиралей. Более плотная, 3_{10} -спираль, обладает характерным рисунком водородных связей $(i, i + 3)$. Такая спираль содержит 3

аминокислоты на виток, что составляет примерно 10 тяжёлых атомов на виток. Более разряженная, π -спираль обладает рисунком водородных связей $(i, i + 5)$. Она настолько широка, что через её внутреннюю полость может проходить молекула воды.

3 β -ЛИСТЫ

В дополнение к α -структуре, β -структура является ещё одним очень распространённым типом локальной пространственной компоновки аминокислот. β -листы состоят из β -цепей, связанных с боков 2-мя или 3-мя водородными связями, образуя слегка закрученные, складчатые листы. Более высокоуровневые структуры, образованные множеством бета-листов приводят к образованию белковых агрегатов и фибрилл, наблюдаемых при многих заболеваниях человека и животных, в частности, амилоидозы (в том числе, болезнь Альцгеймера). Выделяют две возможных геометрических компоновок β -цепей в β -листы: параллельная и антипараллельная (Рис. 2). В антипараллельном β -листе, направления амидных связей полипептидных цепей противоположны. Элементарным антипараллельным β -листом можно считать β -шпильку, когда две β -цепи соединены коротким поворотом цепи (Рис. 3). Параллельный β -лист состоит из β -цепей, параллельных друг-другу. В антипараллельном β -листе водородные связи несколько лучше расположены геометрически, так как соответствующие атомы оказываются друг напротив друга.

4 Повороты и петли

Повороты представляют из себя резки изменения направления полипептидной цепи. Обычно, повороты образуются между двумя антипараллельными β -цепями (например, в β -шпильке). По определению, две аминокислоты i и $i + 1$ образуют поворот, если расстояние между аминокислотами $i - 1$ и $i + 2$ меньше, чем 7\AA . Петли обычно длиннее поворотов (до пяти аминокислот) и соединяют другие типы вторичных структур, такие как α -спирали и параллельные β -листы. Обычно, повороты и петли сильно погружены в растворитель.

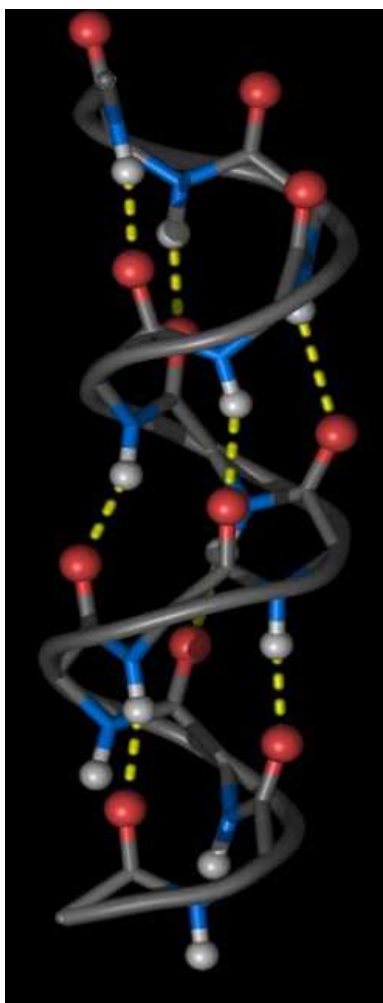


Рис. 1: Скелетная структура α -спирали. Водородные связи между кислородом (красный) и амидной группой (голубой и серый) показаны жёлтой пунктирной линией. Скелетная структура показана в виде серой трубки.

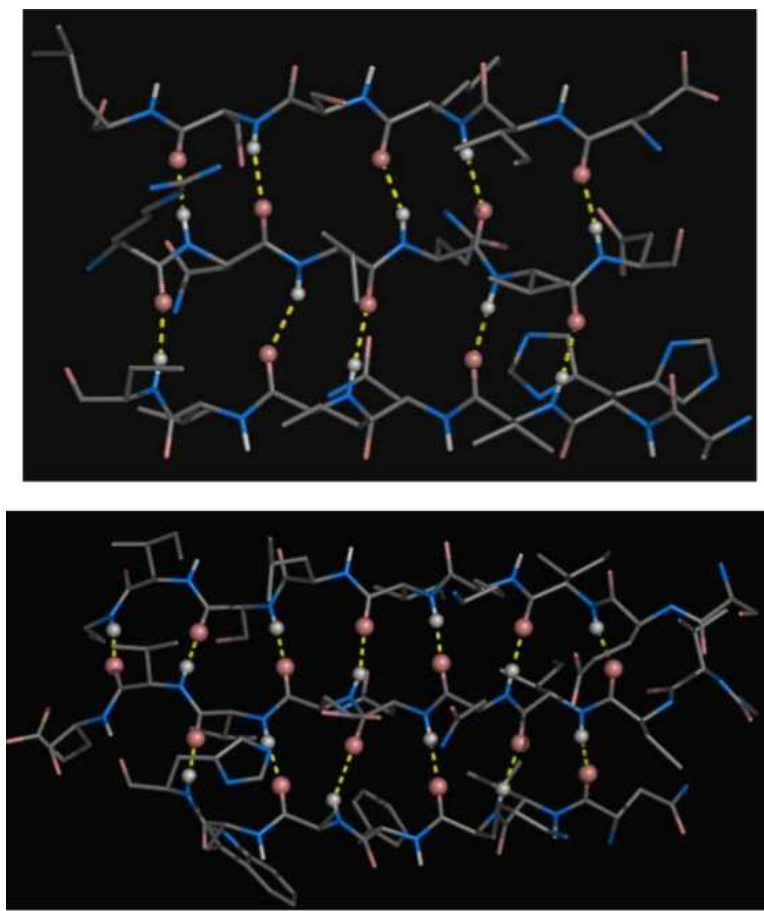


Рис. 2: Параллельный (верхняя панель) и антипараллельный (нижняя панель) β -листы. Водородные связи между атомами кислорода (розовый) и амидными группами (голубой и серый) показаны жёлтой пунктирной линией.

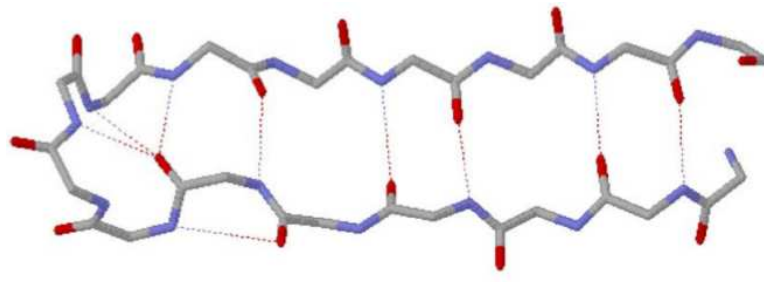


Рис. 3: Структура β -шпильки из белка GB1, которая хорошо иллюстрирует элементарный антипараллельный β -лист. Водородные связи показаны при помощи пунктирных линий между кислородами (красный) и амидными группами (синий) амидной цепи.