



Факультет биоинженерии и биоинформатики  
МГУ имени М.В.Ломоносова

# Биоинформатика трансмембранных белков

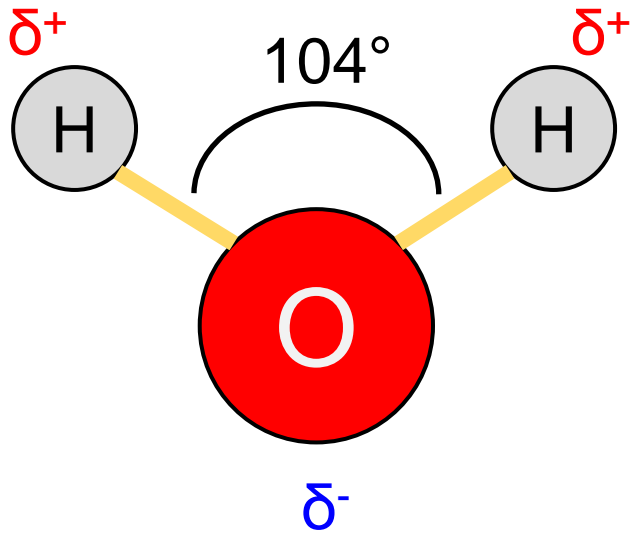
**Дарья Владимировна Диброва**

**(к.б.н., с.н.с.)**

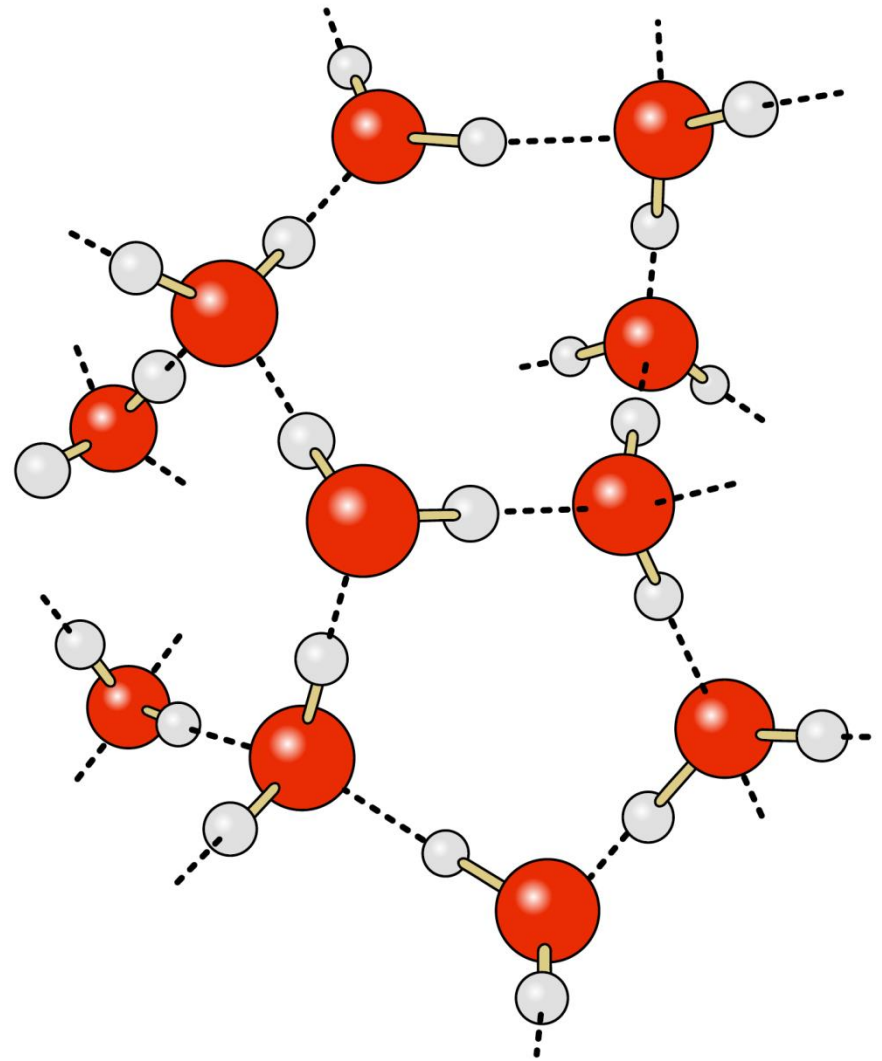
**Лекция №9 МФК «Биоинформатика»**

2024 год

# Молекулы воды полярны



Молекула воды ( $\text{H}_2\text{O}$ )  
в растворе может  
образовать 4  
**водородные связи**



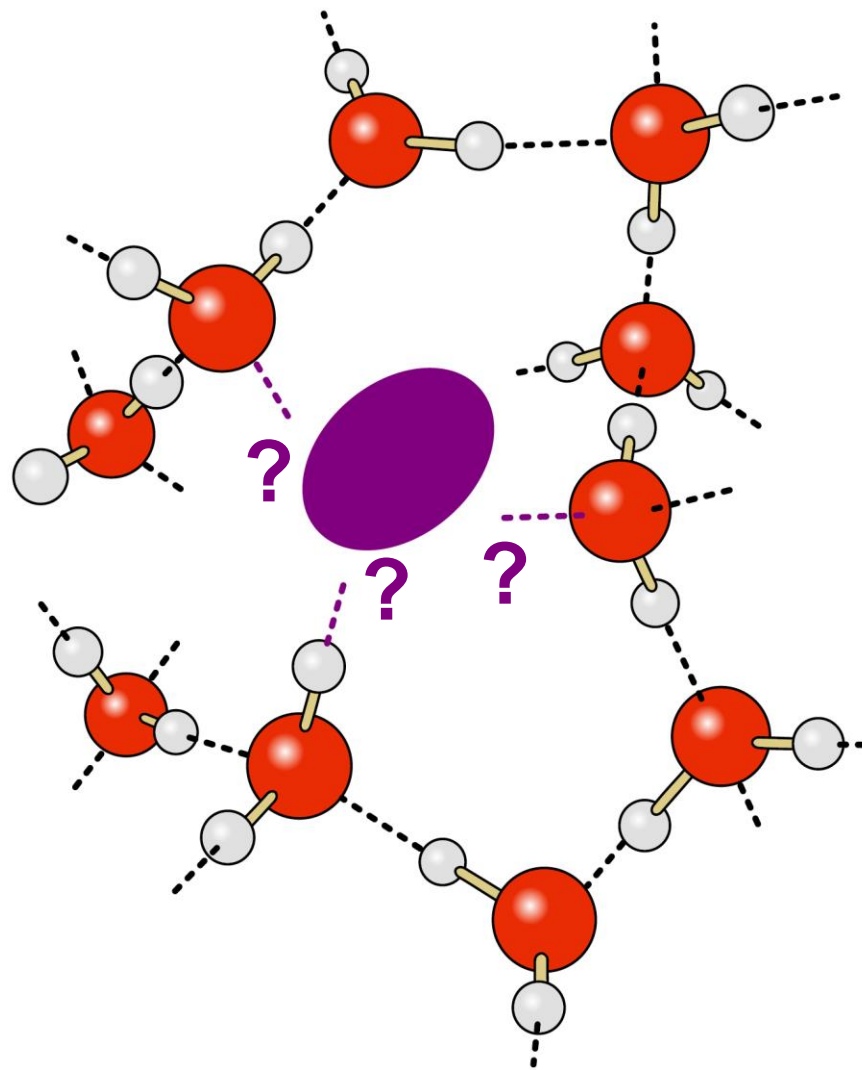
Источник рисунка:

[https://ru.wikipedia.org/wiki/Водородная\\_связь](https://ru.wikipedia.org/wiki/Водородная_связь)

# Что если поместить в воду нечто?

Два варианта:

- 1) Если вещество **полярное**, оно «встроится» в сеть водородных связей и его нахождение в водной фазе будет энергетически выгодно;
- 2) Если вещество **неполярное**, вода будет взаимодействовать сама с собой, а вещество она «вытолкнет».

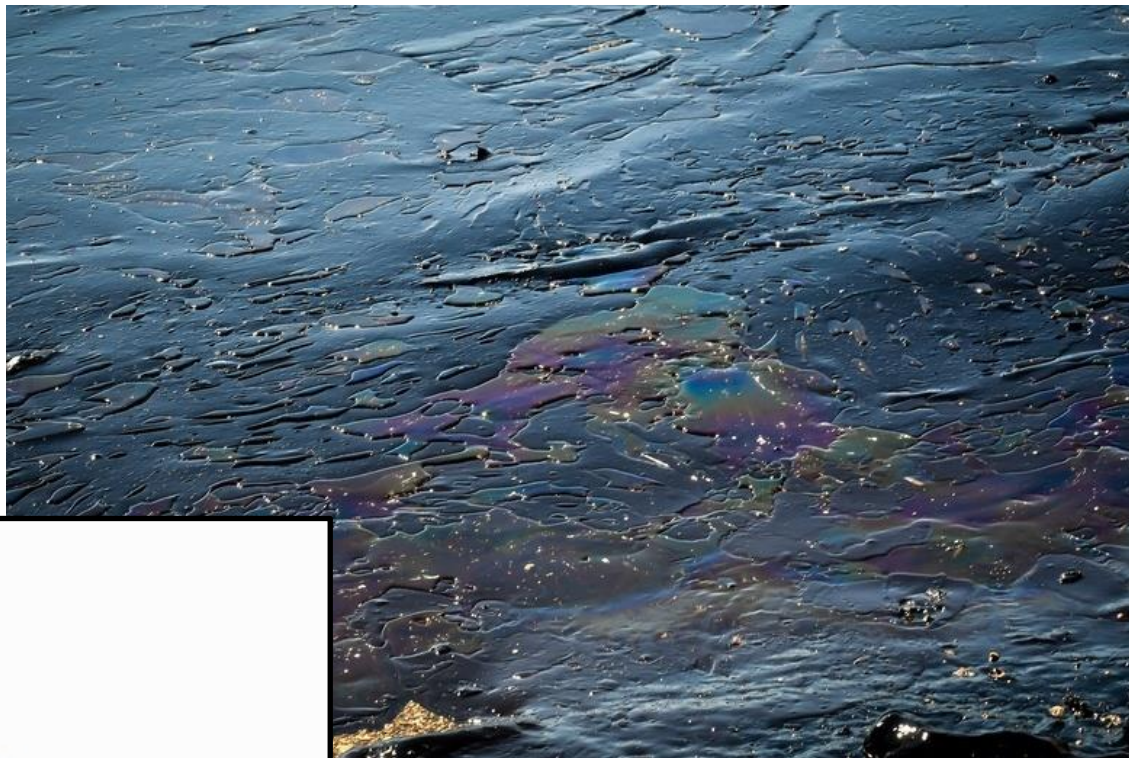


Источник рисунка:

[https://ru.wikipedia.org/wiki/Водородная\\_связь](https://ru.wikipedia.org/wiki/Водородная_связь)

# «Гидрофобные» вещества

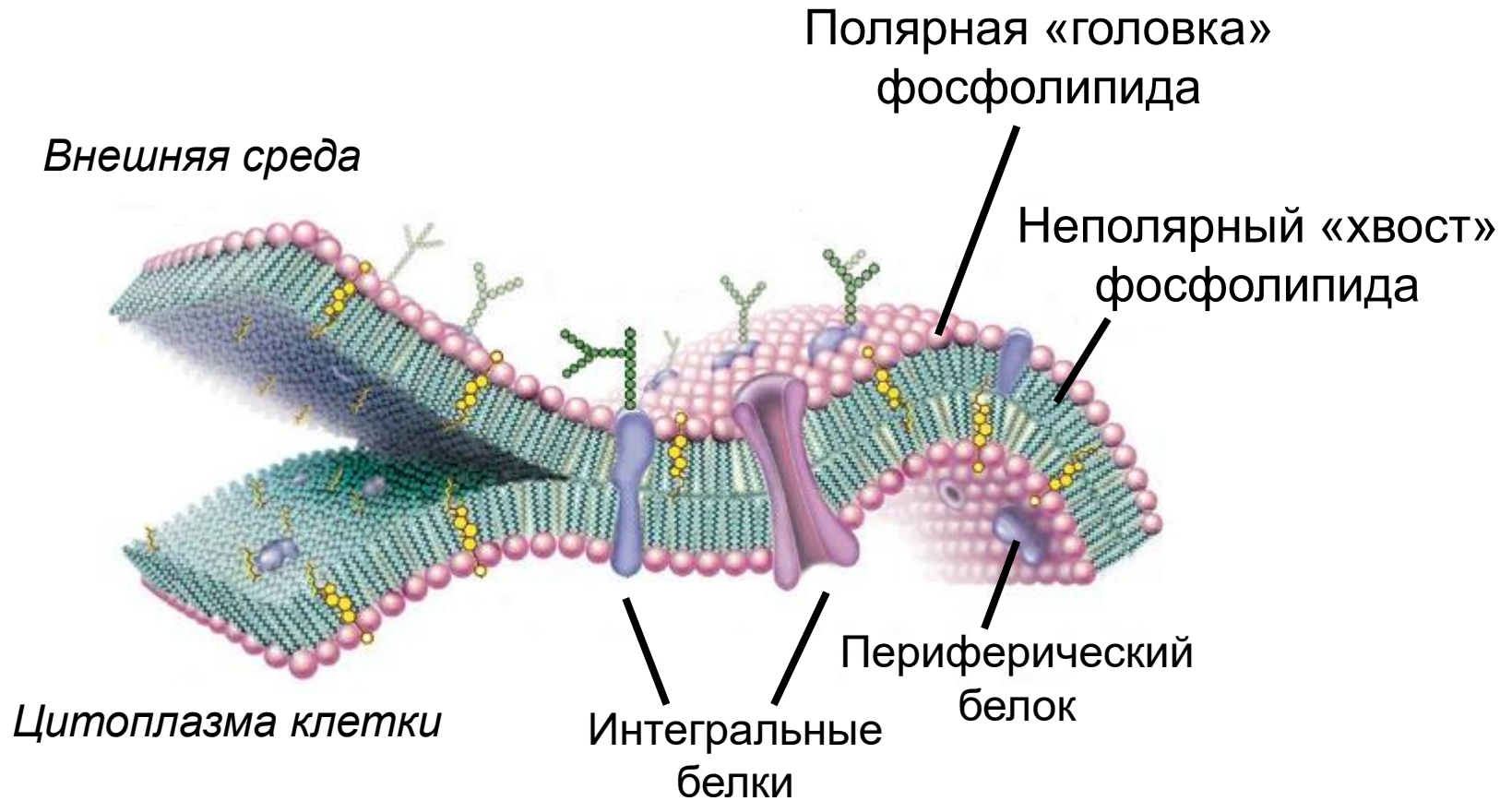
Например,  
растительное масло  
или нефть –  
**неполярные**  
жидкости, и они не  
смешиваются с водой



Источник рисунка:  
<https://tomsk.bezformata.com/>

Источник рисунка:  
<https://www.istockphoto.com/>

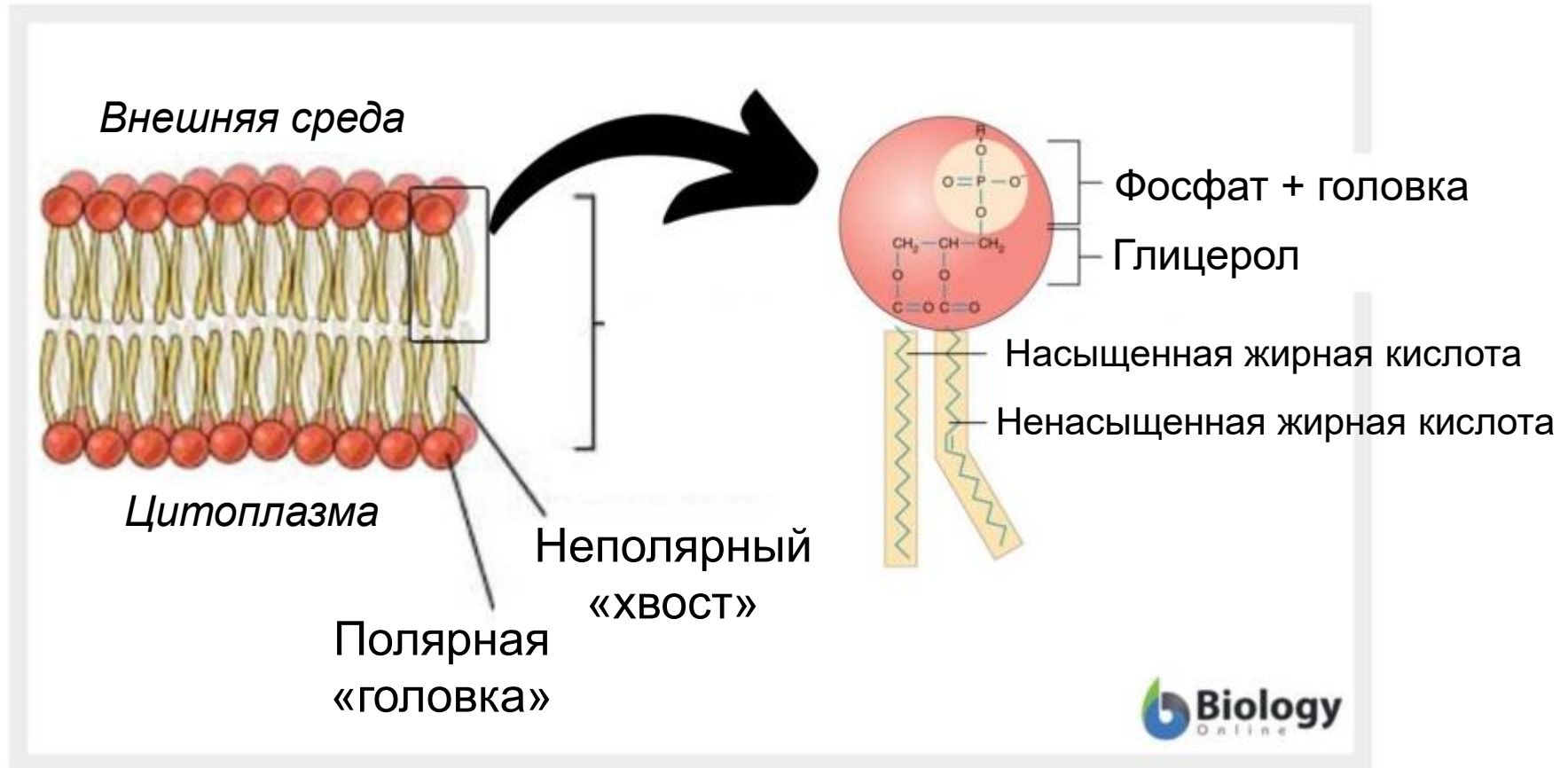
# Строение клеточных мембран: издалека



Источник рисунка:

<https://www.britannica.com/science/cell-membrane>

# Строение клеточных мембран: поближе



Источник рисунка:

<https://www.biologyonline.com/dictionary/cell-membrane>

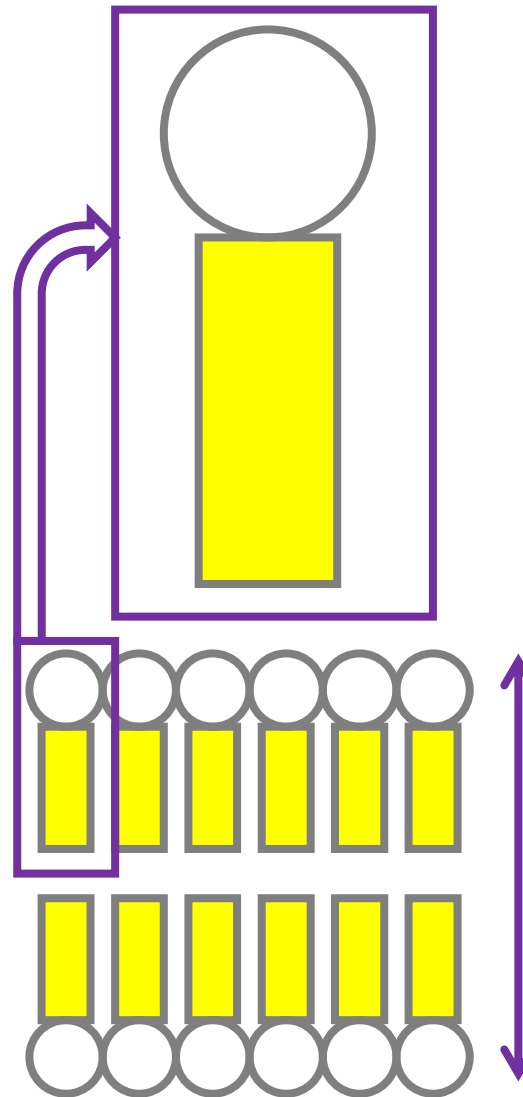
# Два важных факта о клеточной мембране

(1)

Клеточная мембрана предоставляет **гидрофобное окружение** молекулам, погруженным в нее (внутри не содержит групп, которые способны образовывать водородные связи)

(2)

Клеточная мембрана всегда **ориентирована**, т.е. ее две стороны качественно различаются



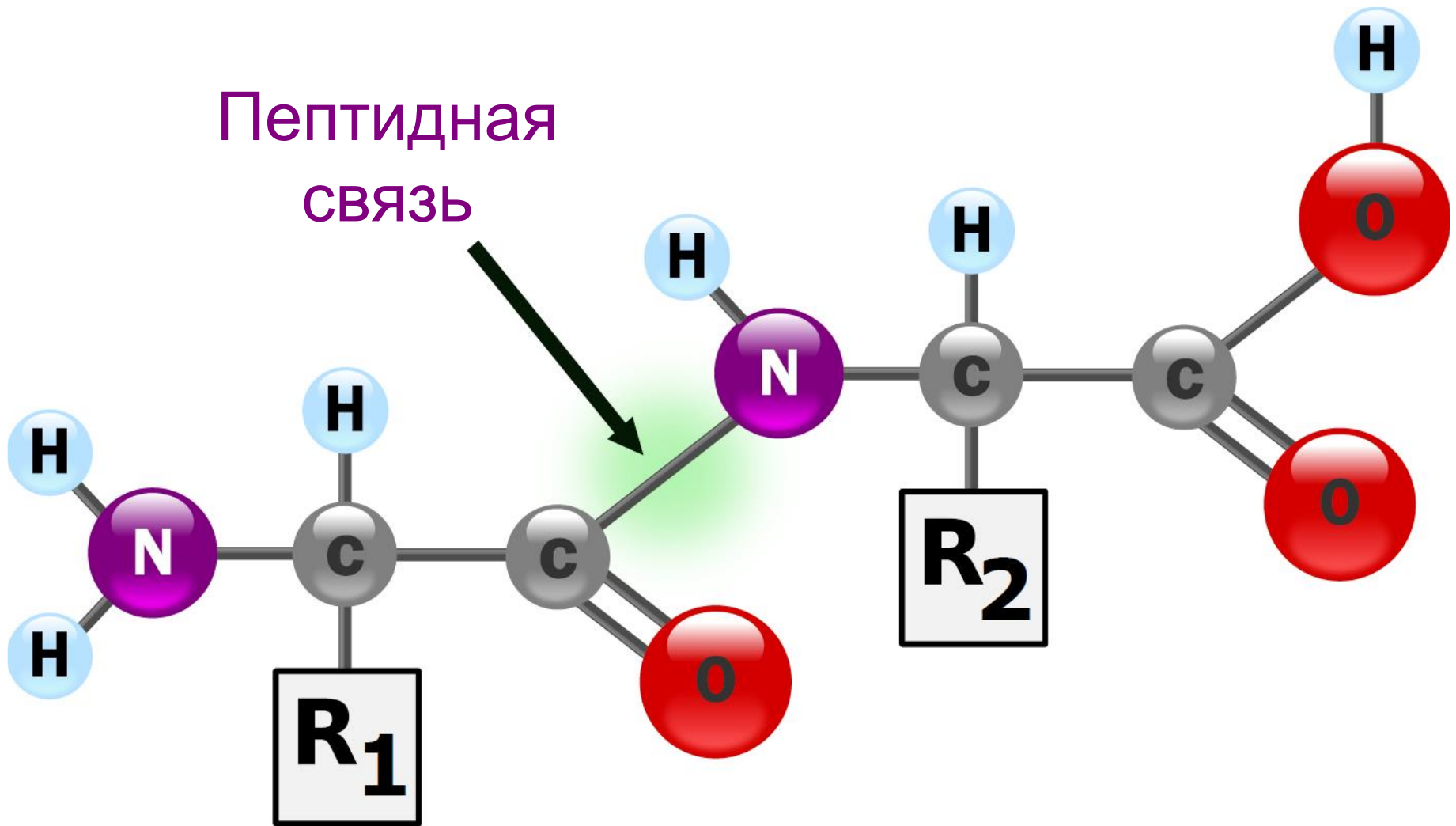
Полярная  
«головка»

Гидрофобные  
«ХВОСТЫ»

Липидный  
бислой  
~ 40Å

# Каково белку в клеточной мембране?

Пептидная  
связь



Источник рисунка:

[https://ru.wikipedia.org/wiki/Пептидная\\_связь](https://ru.wikipedia.org/wiki/Пептидная_связь)



# Как поместить белок в мембрану?

## Требование:

все способные образовывать водородные и ионные связи атомы должны быть уже задействованы в таких связях

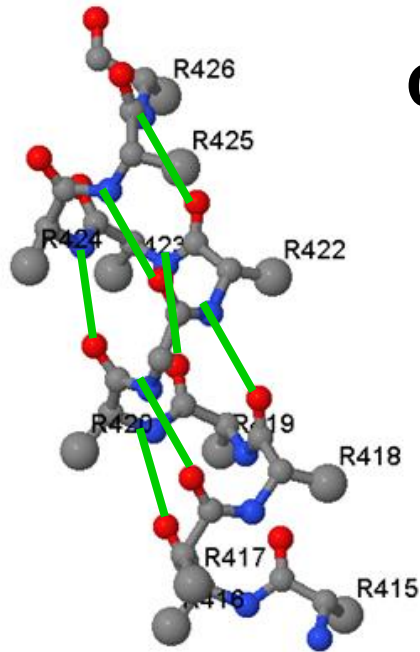
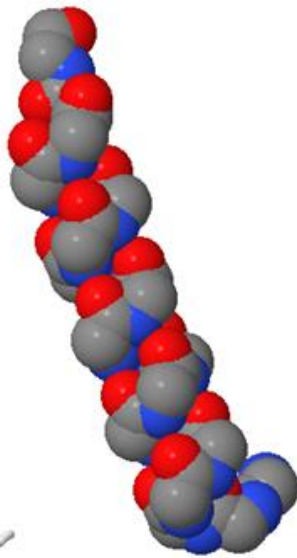
## Решение, 1 часть:

Упаковать главную цепь белка в структуру, где все возможные водородные связи уже образованы

**1а)** Одна или несколько  $\alpha$ -спиралей, пронизывающих мембрану  
**(чаще всего)**

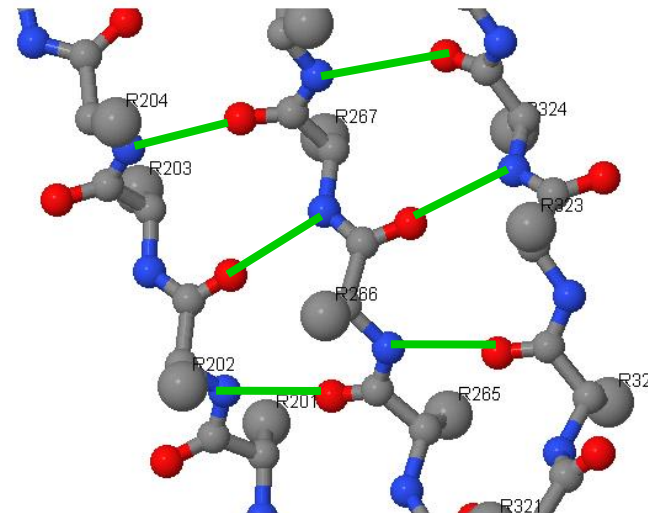
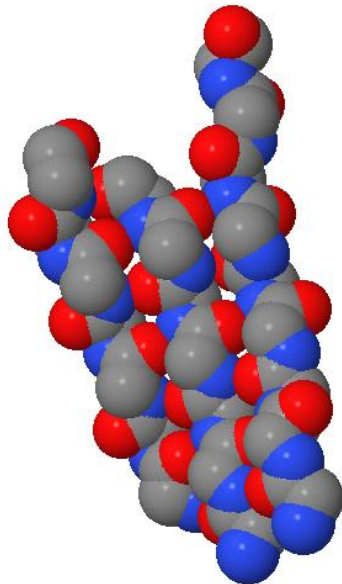
**1б)** Циклический  $\beta$ -лист

# Элементы вторичной структуры



## $\alpha$ -спираль

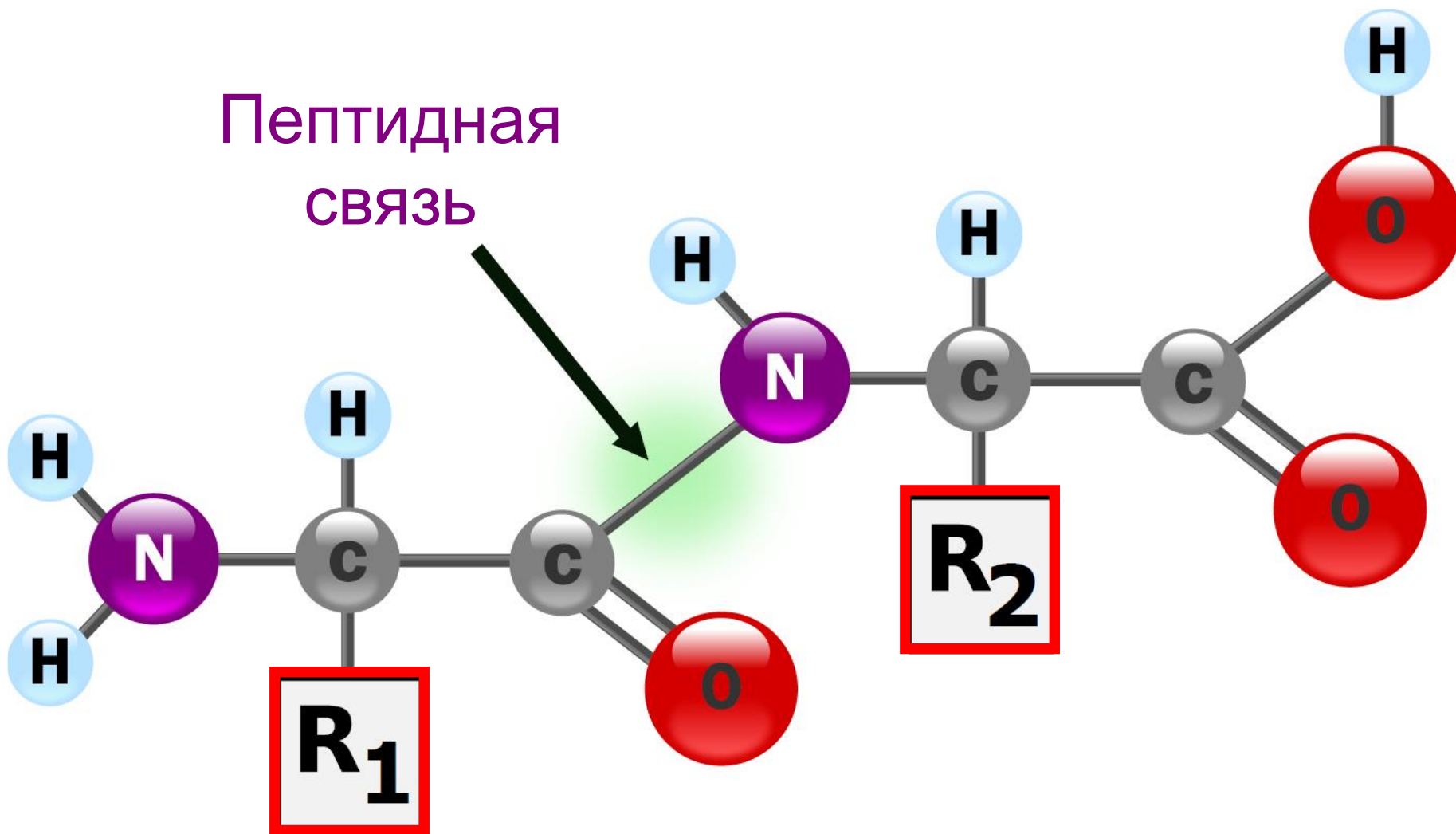
—  $< 3 \text{ \AA}$   
(водородные  
связи)



## $\beta$ -лист

# Кроме «главной цепи» есть еще боковые!

Пептидная  
связь



Источник рисунка:

[https://ru.wikipedia.org/wiki/Пептидная\\_связь](https://ru.wikipedia.org/wiki/Пептидная_связь)

# Классификация протеиногенных аминокислот

## ДВАДЦАТЬ ОДНА ПРОТЕИНОГЕННАЯ $\alpha$ -АМИНОКИСЛОТА

Заряд боковой цепи указан при физиологическом pH 7.4

Величины  $pK_a$  показаны курсивом

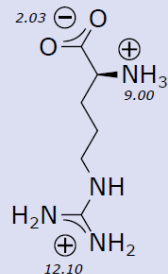
⊕ Положительно  
⊖ Отрицательно

### А. Аминокислоты с заряженными боковыми цепями

#### Положительно заряженные

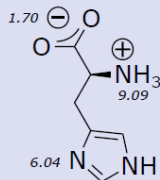
Аргинин

Arg R



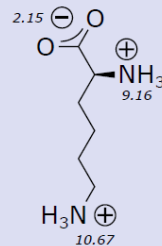
Гистидин

His H



Лизин

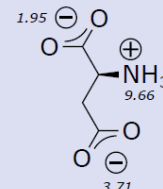
Lys K



#### Отрицательно заряженные

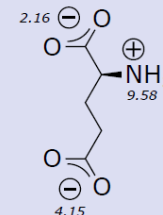
Аспартат

Asp D



Глутамат

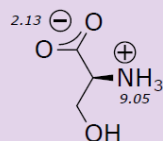
Glu E



### Б. Аминокислоты с полярными незаряженными цепями

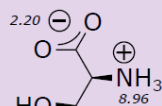
Серин

Ser S



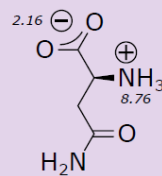
Треонин

Thr T



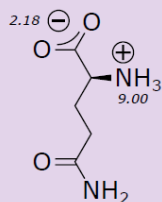
Аспарагин

Asn N



Глутамин

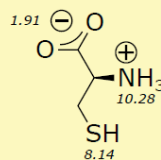
Gln Q



### В. Особые случаи

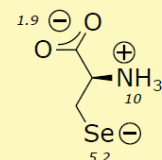
Цистеин

Cys C



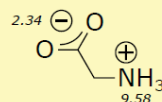
Селеноцистеин

Sec U



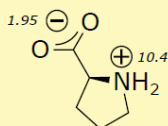
Глицин

Gly G



Пролин

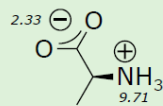
Pro P



### Г. Аминокислоты с гидрофобными боковыми цепями

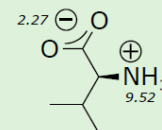
Аланин

Ala A



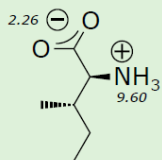
Валин

Val V



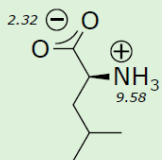
Изолейцин

Ile I



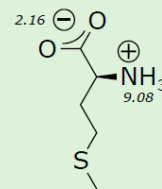
Лейцин

Leu L



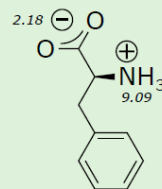
Метионин

Met M



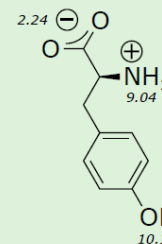
Фенилаланин

Phe F



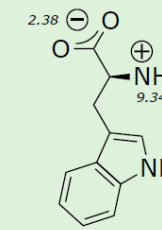
Тирозин

Tyr Y



Триптофан

Trp W



Источник рисунка:

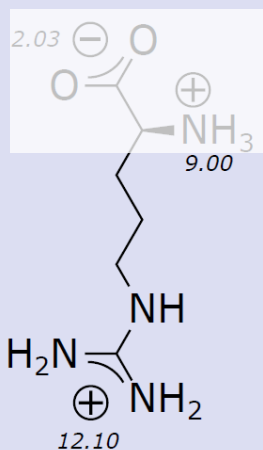
[https://en.wikipedia.org/wiki/Amino\\_acid](https://en.wikipedia.org/wiki/Amino_acid)

# Аминокислоты с заряженными боковыми цепями

## Положительно заряженные

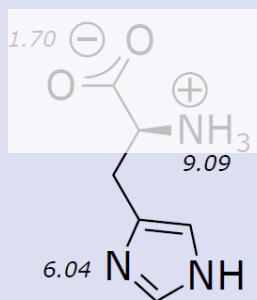
Аргинин

Arg R



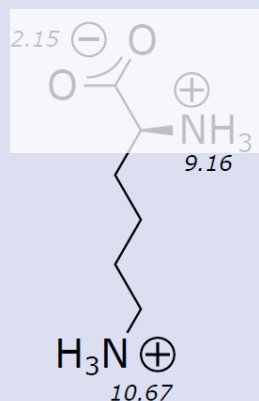
Гистидин

His H



Лизин

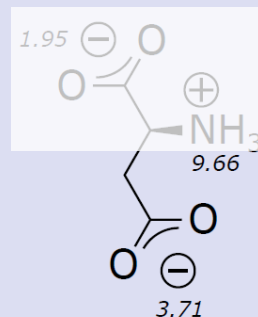
Lys K



## Отрицательно заряженные

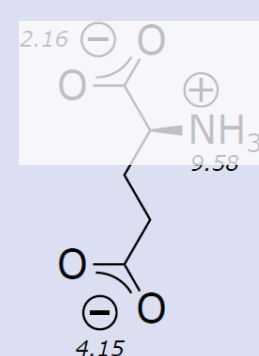
Аспартат

Asp D



Глутамат

Glu E



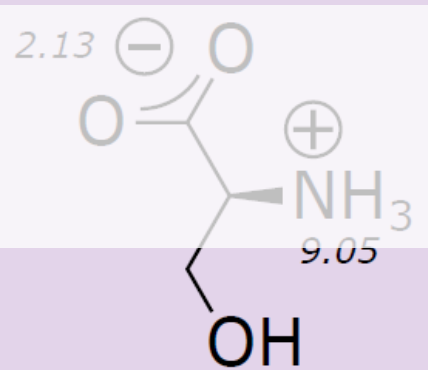
Заряженные остатки = «очень полярные»,  
у них не частичный заряд ( $\delta^+$  или  $\delta^-$ ), а  
полноценный!

# Аминокислоты с полярными боковыми цепями

Серин

Ser

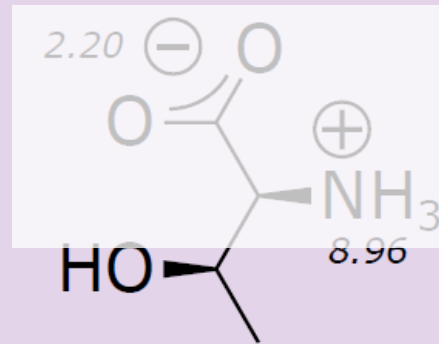
S



Треонин

Thr

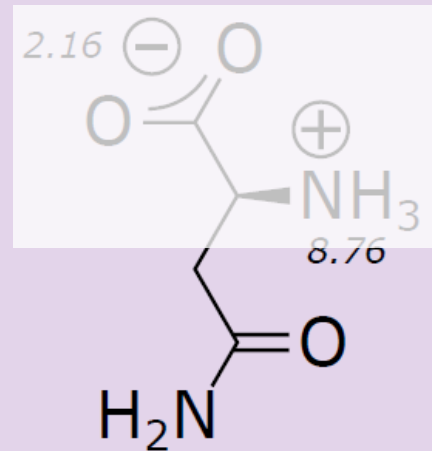
T



Аспарагин

Asn

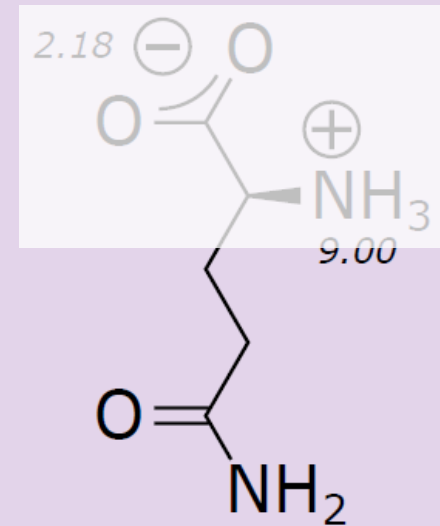
N



Глутамин

Gln

Q

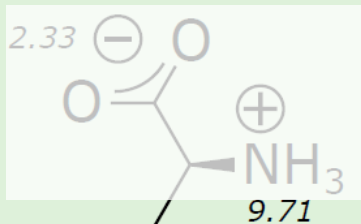


Охотно образуют водородные связи между собой или с молекулами воды – и как доноры, и как акцепторы

# Аминокислоты с неполярными боковыми цепями

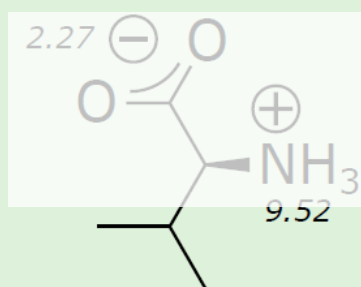
Аланин

Ala A



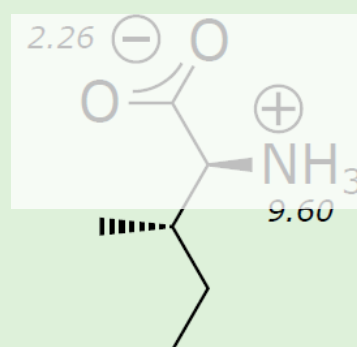
Валин

Val V



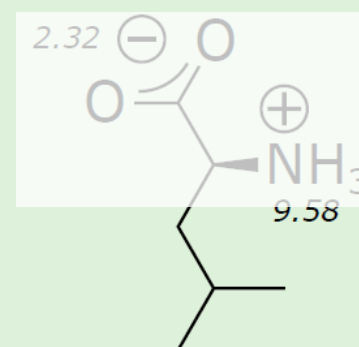
Изолейцин

Ile I



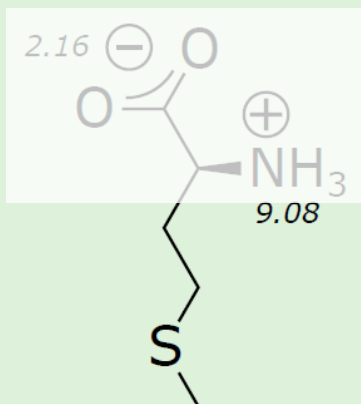
Лейцин

Leu L



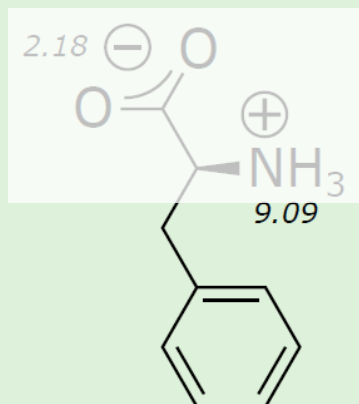
Метионин

Met M



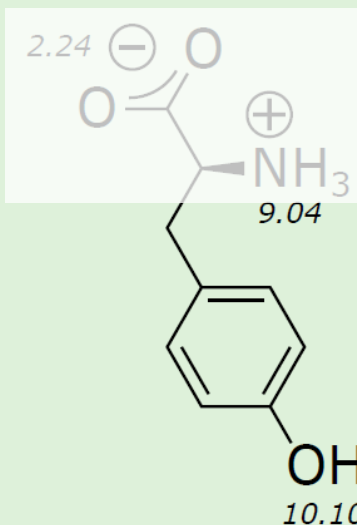
Фенилаланин

Phe F



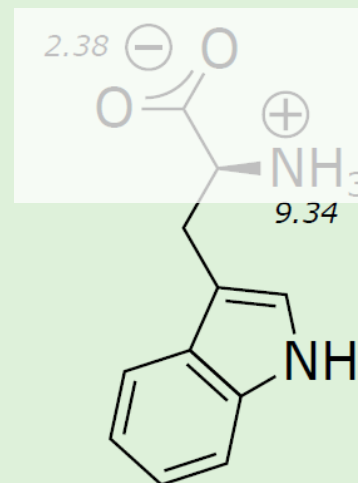
Тирозин

Tyr Y



Триптофан

Trp W

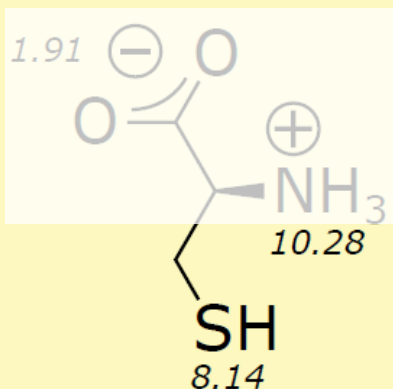


Источник рисунка:  
[https://en.wikipedia.org/wiki/Amino\\_acid](https://en.wikipedia.org/wiki/Amino_acid)

# «Особые случаи»

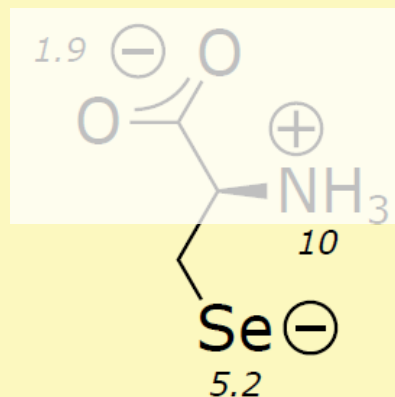
Цистеин

Cys C



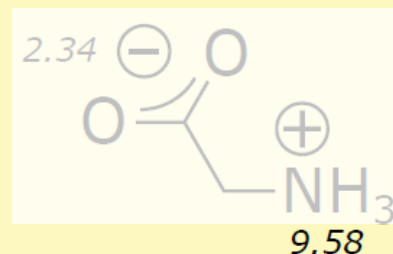
Селеноцистеин

Sec U



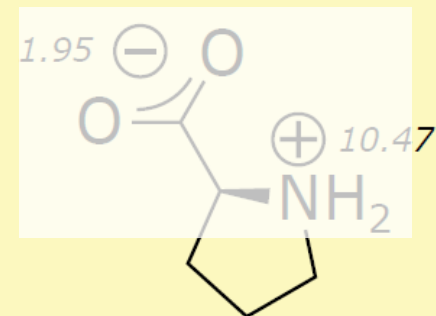
Глицин

Gly G



Пролин

Pro P

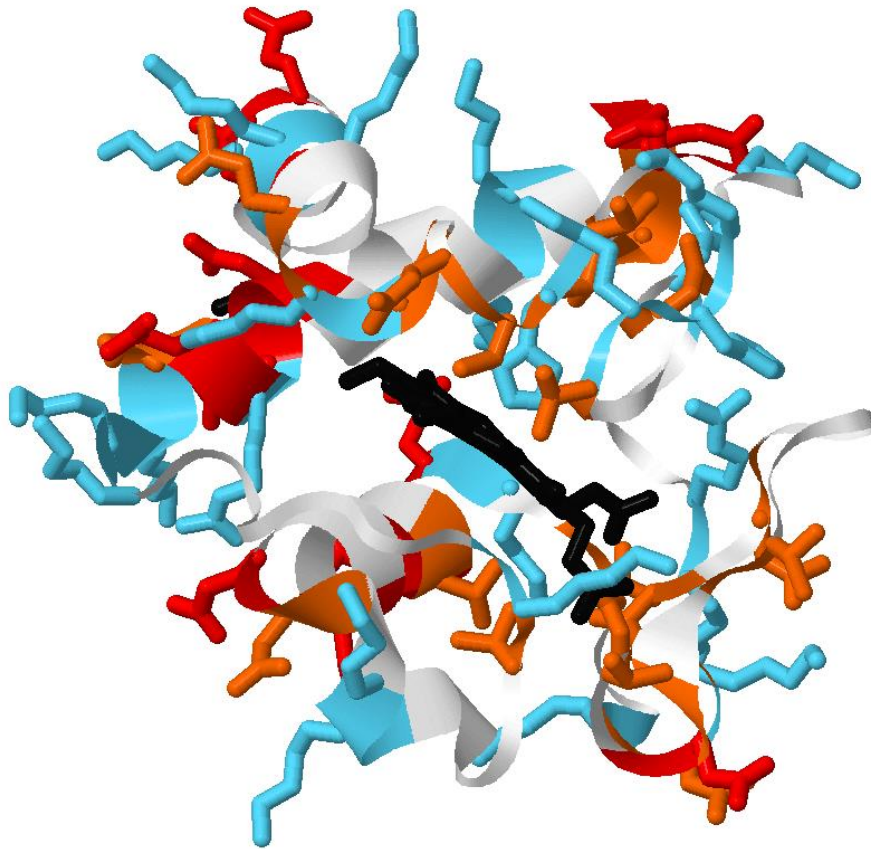


Боковая цепь цистеина тоже может образовывать разные водородные связи

Mazmanian K. *et al.* (2016) Preferred Hydrogen-Bonding Partners of Cysteine: Implications for Regulating Cys Functions. *J. Phys. Chem. B.*, 120:39, 10288–10296.



# С полярными боковыми цепями нужно что-то делать



Цитохром с лошади  
(PDB:1hrc)

Lys, Arg, His      Asn, Gln, Ser,  
Asp, Glu      Thr

- У белков обычно много полярных остатков, и **в воде** они могут быть свободно экспонированы наружу
- **Внутри мембраны** это энергетически невыгодно: этим группам не с кем образовать связь

# Как поместить белок в мембрану?

## Требование:

все способные образовывать водородные и ионные связи атомы должны быть уже задействованы в таких связях

### Решение, 1 часть:

Упаковать главную цепь белка в структуру, где все возможные водородные связи уже образованы

**1а)** Одна или несколько  $\alpha$ -спиралей, пронизывающих мембрану  
**(чаще всего)**

**1б)** Циклический  $\beta$ -лист

### Решение, 2 часть:

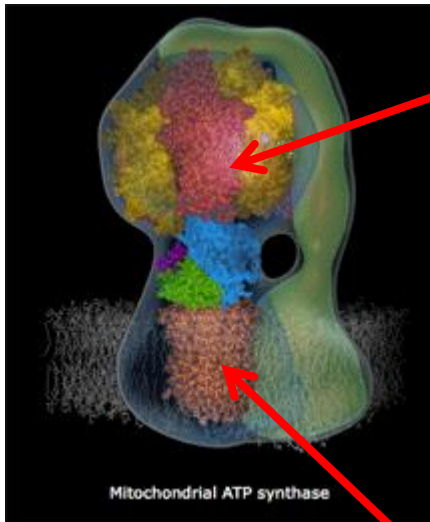
Убрать из мембраны способные образовывать водородные связи (Ser, Thr, Asn, Gln, Cys) и особенно заряженные (Arg, Lys, Asp, Glu, His) остатки

**!** Если такие остатки встречаются посередине мембраны – они должны взаимодействовать с другими молекулами (например, образовывать олигомерный комплекс, координировать гем)

# Роторные мембранные АТФ-синтазы

Источник анимации:

<http://www.mrc-mbu.cam.ac.uk/>



## Цитоплазматическая часть

(в том числе каталитический  
гексамер  $\alpha_3\beta_3$ )

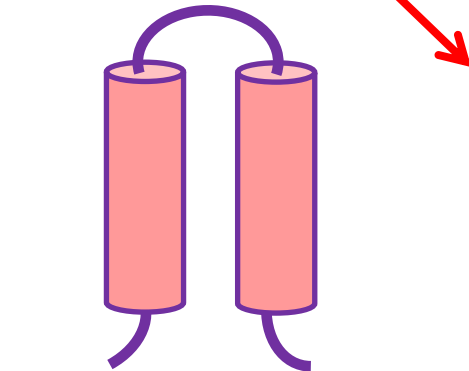
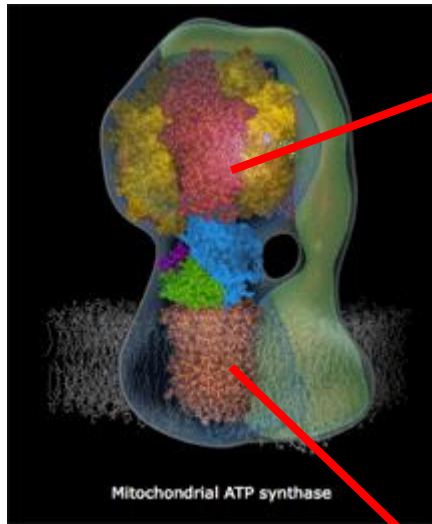
## Мембранная часть

(в том числе кольцевой олигомер  
из нескольких c-субъединиц)

# Мембранные белки отличаются по сиквенсам

Источник анимации:

<http://www.mrc-mbu.cam.ac.uk/>



```

L I S I T D G Q I F L D S H L A A G N Q R P A V D V G L S V S R V G G K A Q P A V L R E V A G R L R L E Y S Q F L E L E M F T R F G G I G D S H V R
V I S I T D G Q I Y L E P D L F F A G I R P A I N V G I S V S R V G G N A Q T K A T K S V S G S L R L D L A A F R E L E A F A Q M G T E L D K A T Q
V I S I T D G Q I F L E S D L F N A G I R P A I N A G I S V S R V G G A A Q T K V I K K L G G G V R L A L A Q Y R E L A A F A Q F A S D L D E A T R
V I S I T D G Q I F L E T S L F N A G I R P A I N A G I S V S R V G G A A Q T K L I K N L S G G I R T D L A Q Y R E L A A F A Q F A S D L D E A T R
V I S I T D G Q I F L E T S L F N A G I R P A I N A G I S V S R V G G A A Q T K L I K N L S G G I R T D L A Q Y R E L A A F A Q F A S D L D E A T R
V I S I T D G Q I F L T T E L F N S G I R P A V D P G I S V S R V G G S A Q C K V I K K L A G G I R T A L A Q Y R E L A A F A Q F A S D L D E T T R
V I S I T D G Q I F L E T D L F N S G I R P A V N A G I S V S R V G G A A Q T K I V K K L G G G I R L A L A Q Y R E L A A F S Q F A S D L D E A T R
V I S I T D G Q I F L E T D L F N S G L R P A V N P G I S V S R V G G A A Q T K I I K K L S G G I R T A L A Q Y R E L A A F S Q F A S D L D D A T R
V I S I T D G Q I F L E S A M F N S G I R P A V N A G I S V S R V G G A A Q T K I I K K L S G G I R T A L A Q Y R E L A A F A Q F A S D L D E A T R
V I S I T D G Q I F L E T N L F N S G I R P A M N A G I S V S R V G G A A Q T K I M K K L G G N I R L A L A Q Y R E L A A F A Q F A S D L D E A T R
V I S I T D G Q I F L E T S S F N A G I R P A M N A G I S V S R V G G A A Q T K I V K K L G G G I R L A L A Q Y R E L A A F A Q F A S D L D E A T R
L I S I T D G Q I Y L S P Q L V Q K N Q F P A V H Q G L S V S R V G S K A Q S R A L R K V A G N L R V T L S Q F E E L E D F A R F G T R L D D A T R
L I S I T D G Q I Y L S P Q L V R K N Q F P A V D L G L S V S R V G S K A Q N R T L R G V S G N L R V T L S Q F E E L E D F A R F G T R L D D V T R
L I S I T D G Q I Y L S P T L F R K G V L P A I D V G R S V S R V G G K T Q L P A Y R V V A G D L R L T Y S Q F E E L E R F A R F S S Q L D E D T R
L I S I T D G Q I Y L S P Q L F Q K G I L P A V D V G R S V S R V G G K T Q L P A Y R A V A G D L R L S Y S Q F E E L E A F S R F S S R L D S E T L
L I S I T D G Q I Y L S P E L F Q K S I F P A V D V G K S V S R V G G K T Q L A A Y Q A V S G A L R L A Y A Q F Q E V E V F A R F G T Q L D E Q T K
L V S I T D G Q I Y L T P D L F Q K G I F P A V D V G K S V S R V G G K A Q L P A Y R D V A G D L R L S Y T Q F E E L E S F A R F G T R L E E S T R
L I S I T D G Q I Y L S P D L F Q K G V L P A V D V G K S V S R V G G K T Q L P A Y S A V A G D L R L S Y S Q F Q E V E V F A R F G T Q L D E E T R
L I S I T D G Q I Y L S P D L Y Q K G I L P A V S V G K S V S R V G G K T Q L R A Y G E V A G D L R L S Y S Q F Q E V E V F A R F G T Q L D E D T R
    
```

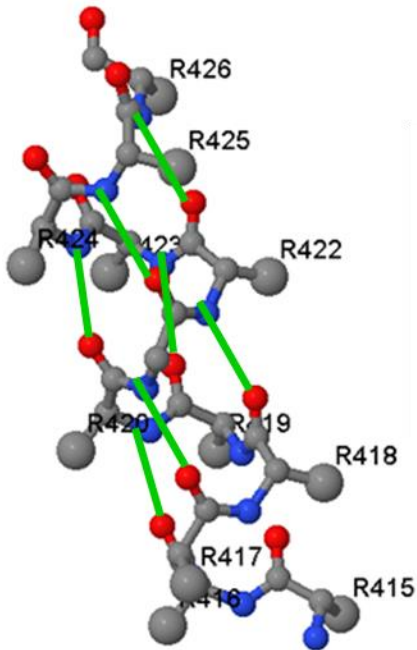
```

A T E I G I G L M I G L G A A G A C I G I G I M C S F L E G A A R Q P E M I F T L D G K V F L L L G L I D A S F I I G V G L A M L F A F G N F L
G L V A L A C G L I V G L G A I G A S I G I A L M G G K F L E A S A R Q P E L M N D L Q T K M F I L A G L I D A A F L I G V A I A L L F A F A N P F
G L V A L A C G I I V G L G A L G A S I G I A L M G G K F L E S S A R Q P E L M N E L Q T K M F I L A G L I D A A F L I G V A I A L L F A F A K P F
- - V I I A A S I M I G L G A L S T G I G F A L L G G K L L E S T A R Q P E L A P Q L Q T K T F L M A G L L D A V F M I G V G I A M Y L I F V - - -
G N L I I A V G I L I G L C A L G P A I G F G L L G G K F L E S A A R Q P E L A P Q L Q V K M F I V A G L I D A I A M I G V A I A L F L L F V E S A
S S T A I A V A L M I G L A A F G T A V G F A I L G G K F L E A S A R Q P E M S F A L Q T K M F I V A G L L D A I S M I A V G V A L F F V F A N P F
G M T A I A V A L L I G M G A L G T A I G F G L L G G K F L E G A A R Q P E M A F M L Q V K M F I V A G L L D A V T M I G V G I A L F M L F T N P L
- M T A I A V A L L I G L G A L G T A I G F G I L G G K F L E G A A R Q P E M I F M L Q V K M F I V A G L L D A V T M I G V G I A L F F T F A N P F
G L T A I A V A L L I G L G A L G T A I G F G I L G G K F L E G A A R Q P E M V F M L Q V K M F I V A G L L D A V T M I G V G I A L F F T F A N P F
A A S A V G A S T A M I A G I - G P V G G G Y A A G K A V E S V A R Q P E A K G G I I S T M V L G Q A V A E S T G I Y S L V I A L I L L Y A N P F
I V S I L G A A L A V S F G A L G P A L A E G R A V A A A M D A I A R Q P E A A G T L S R T L F V G L A M I E T M A I Y C L V V A V L L L F A N P F
A I S I F T A G F T I A I G C I G P S L A E G R A A A A I A A I A D Q P D A A P T L S R T L F V S L A M I E S T A I Y C F V V A M I L I F A N P F
A I S I F T A G L T I A I G S L G P A L G E G R A A A A I I A A I A D Q P D A A P T L S R T L F V S L A M I E S T A I Y C F V V A M I L I F A N P F
M A S I V I S G L T I A I G S I G P A L G E G R A L S Q A L S A L A D Q P D E A N T I T R V L F V G M A L V E S T A I Y C F V I T L I L I F A N P F
S V A M V T A G I T I A I G S I G P A L G E G M A V A R A L G A I A D Q P D K A N M I T R T L F V G L A M V E S T A I Y C L V V S M I L L F V N P F
M V S I I M A G L T I A I G S I G P A I A E G W A V A R A L G A M A Q P D Q A N T I T R T L F V G L A I I E S T A I Y C F V V S M I L I F A N P F
    
```



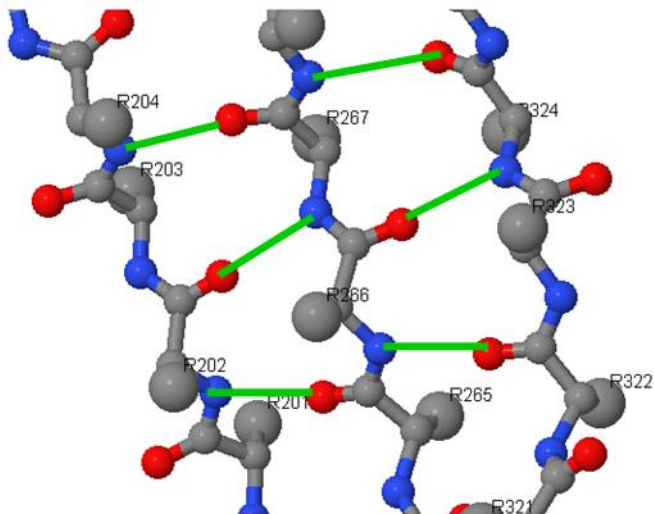
Схема с-субъединицы

# Расположение гидрофобных остатков



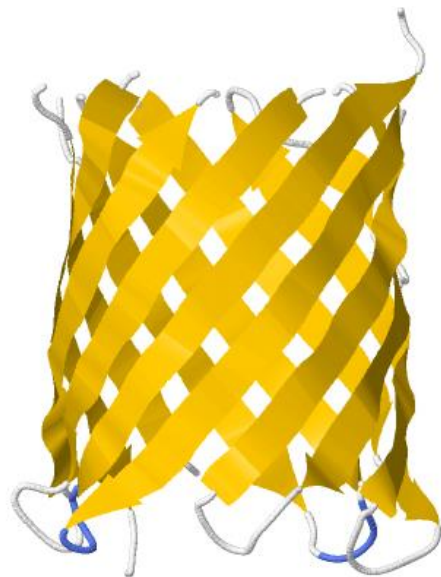
**$\alpha$ -спираль** в мембране:  
неполярные остатки должны  
следовать **подряд** друг за  
другом в последовательности

—————  $< 3 \text{ \AA}$  (водородные связи)

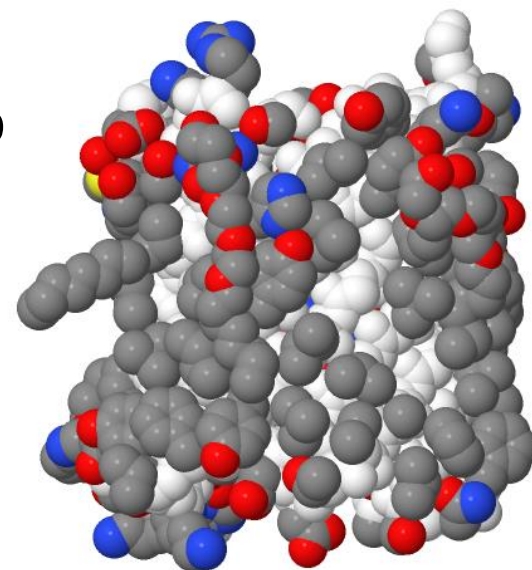


**$\beta$ -лист** в мембране:  
остатки чередуются в  
направлении внутрь-наружу от  
плоскости листа

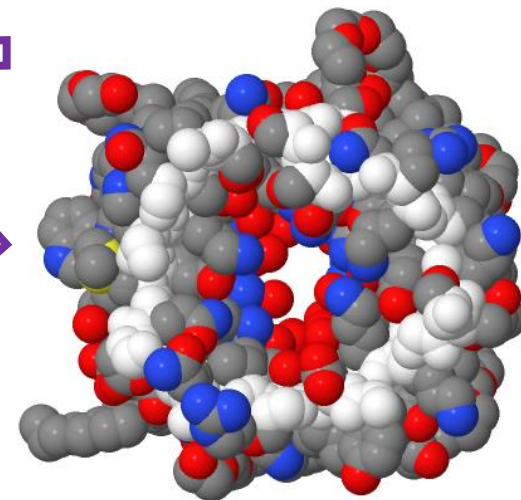
# Внутри не обязательно гидрофобная среда



В виде  $\beta$ -листов часто организованы **порины**, через которые может осуществляться диффузия молекул

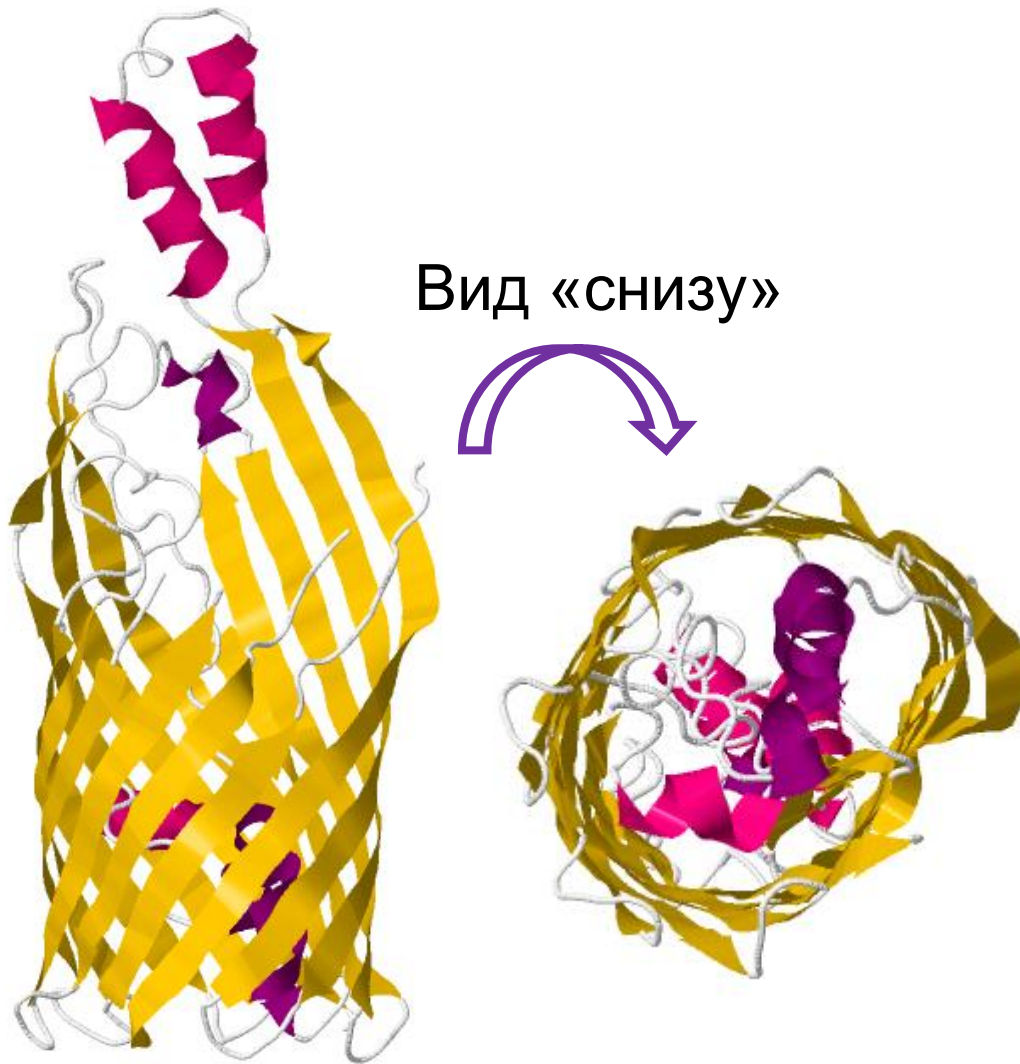


Вид «сверху»



(Атомы покрашены по химическому типу, кроме атомов главной цепи, покрашенный белым)

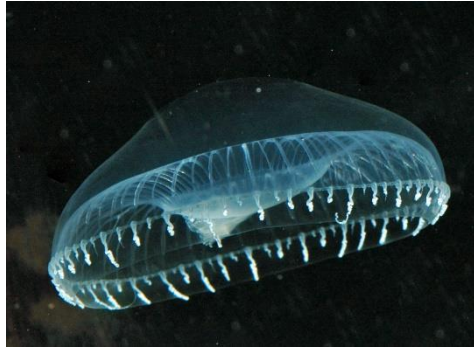
# Внутри не обязательно гидрофобная среда



Часто бывает, что  
внутри  $\beta$ -бочонка  
находится «пробка»  
из других частей  
белка или связанных  
молекул

Fatty Acid Transporter FadL (PDB:2r88)

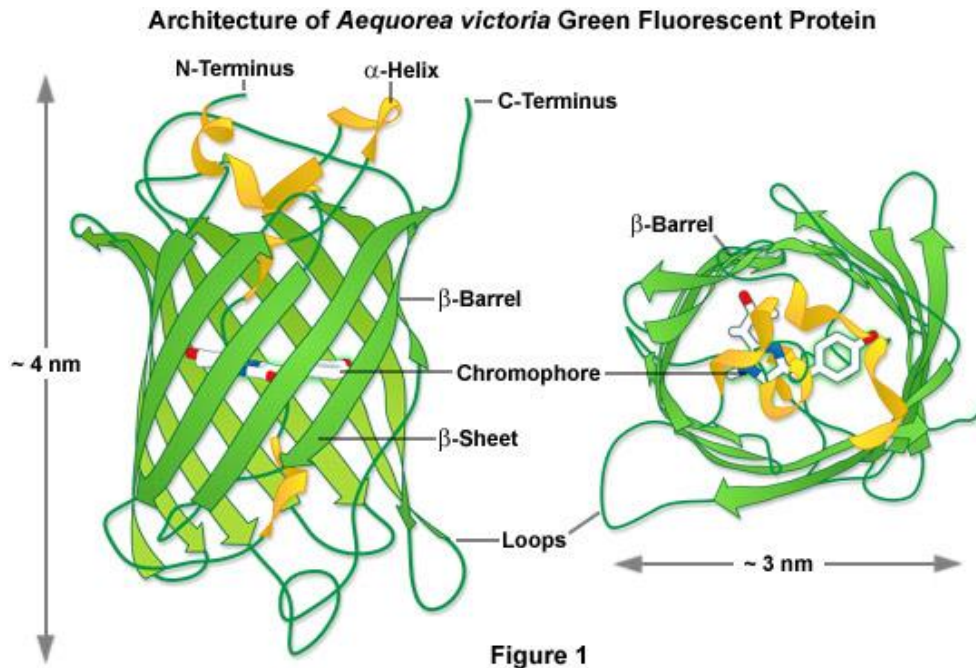
# ... а $\beta$ -бочонок не всегда мембранный



Медуза  
*Aequorea victoria*

Источник рисунка:  
[https://en.wikipedia.org/wiki/Aequorea\\_victoria](https://en.wikipedia.org/wiki/Aequorea_victoria)

Белок **GFP** (green fluorescent protein) чрезвычайно широко применяется в генной инженерии: его ген присоединяют к целевому гену и визуально смотрят, где экспрессируется белок!



Источник рисунка:  
<https://zeiss-campus.magnet.fsu.edu/articles/probes/jellyfishfps.html>



Источник рисунка:  
[https://en.m.wikipedia.org/wiki/File:GFP\\_Mice\\_01.jpg](https://en.m.wikipedia.org/wiki/File:GFP_Mice_01.jpg)



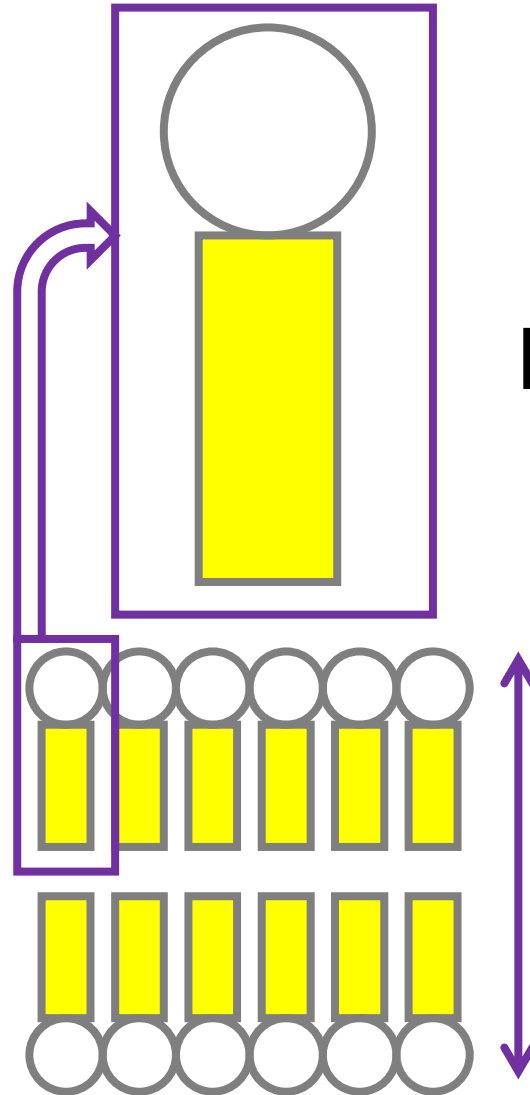
# Два важных факта о клеточной мембране

(1)

Клеточная мембрана предоставляет гидрофобное окружение молекулам, погруженным в нее (внутрине содержит групп, которые способны образовывать водородные связи)

(2)

Клеточная мембрана всегда **ориентирована**, т.е. ее две стороны качественно различаются

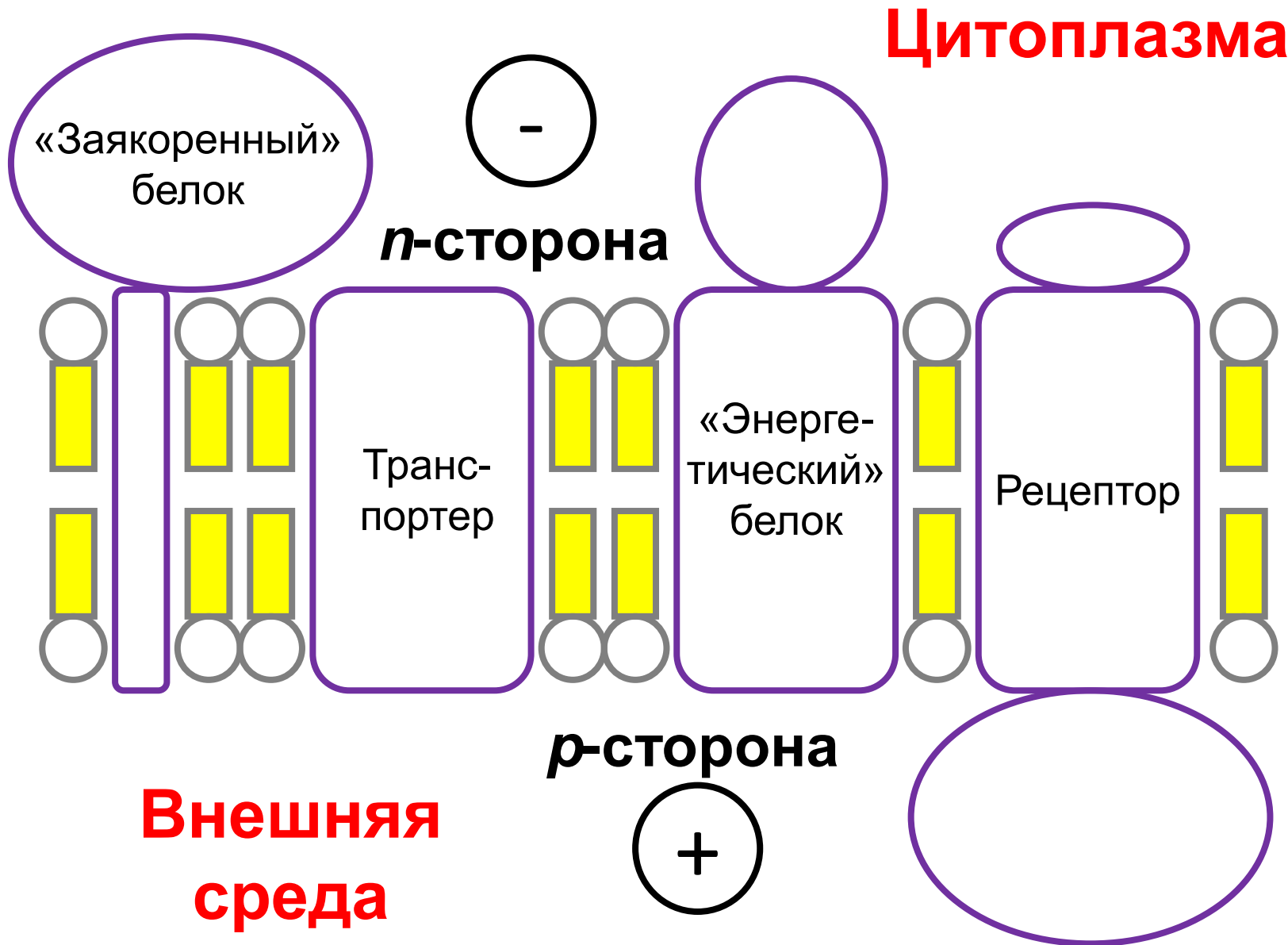


Полярная  
«головка»

Гидрофобные  
«ХВОСТЫ»

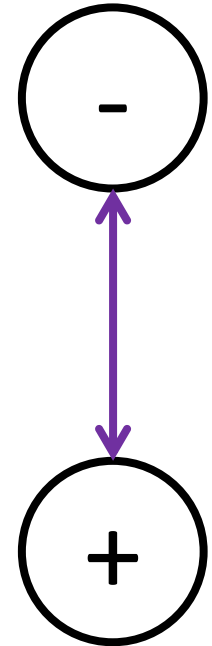
Липидный  
бислой  
~ 40Å

# Ориентация мембраны и трансмембранные белки



# Правило “positive-inside”

Часть белка, расположенная с ***n*-стороны** от мембраны (цитоплазма бактерии, матрикс митохондрии и строма хлоропласта по отношению к внутренним мембранам и т.п.), содержит больше **положительно заряженных остатков** (Lys, Arg, His)



Gunnar von Heijne (1992)

Membrane protein structure prediction: hydrophobicity analysis and the positive-inside rule

*J Mol Biol*, 225(2):487-494

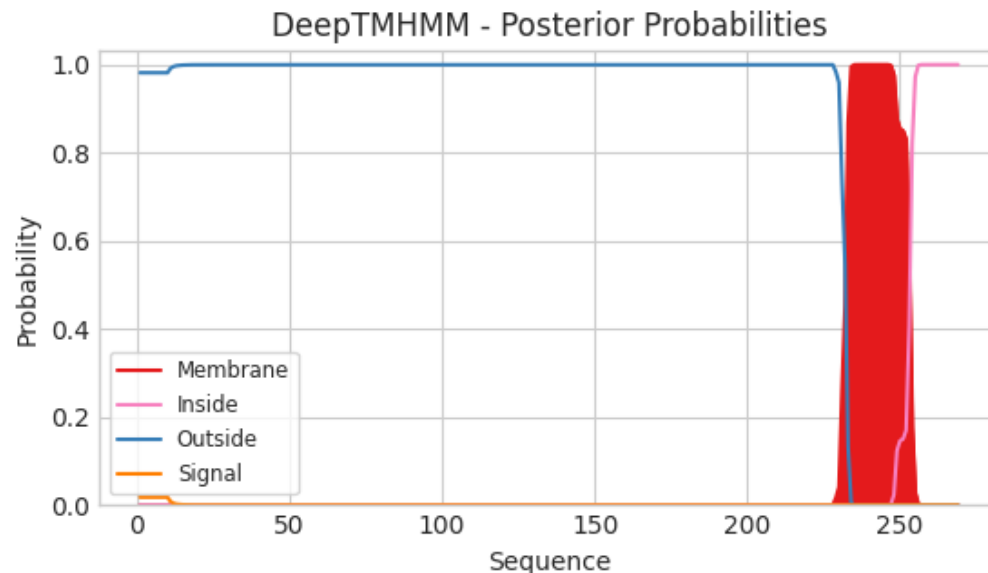
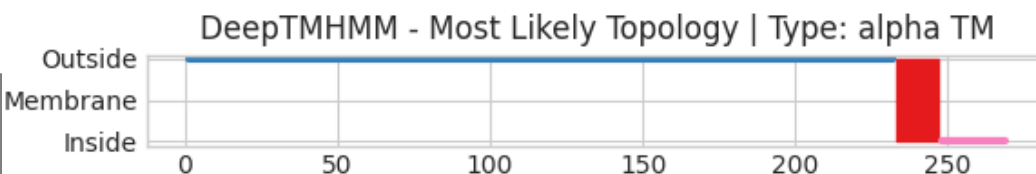
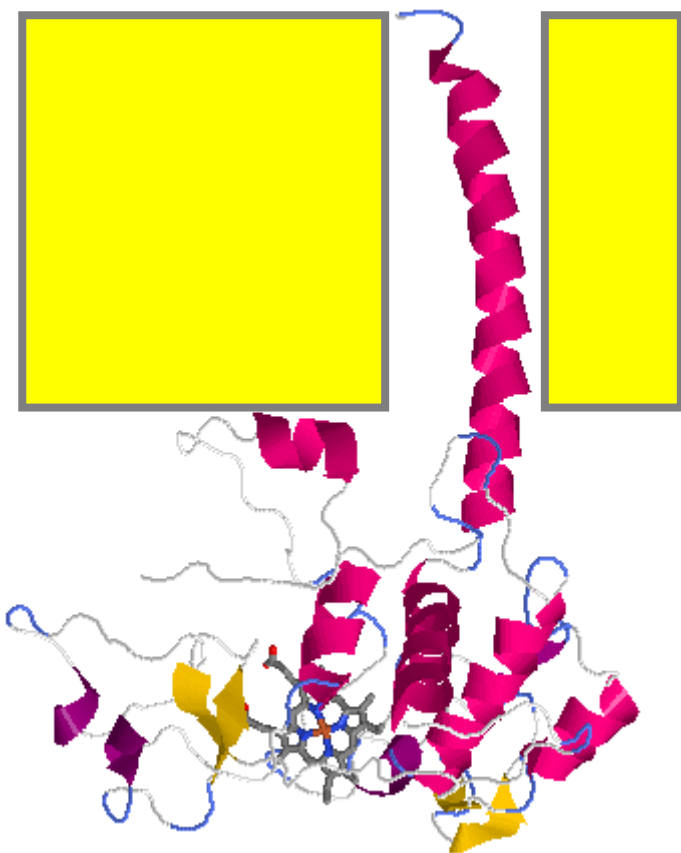


# Сервис DeepTMHMM

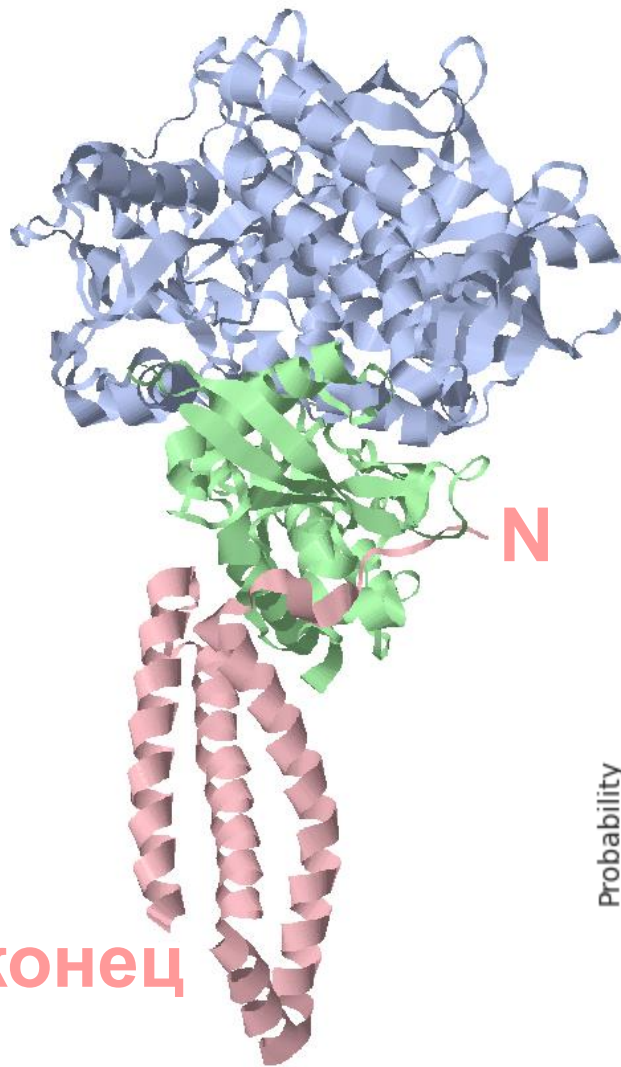
DeepTMHMM – программа для предсказания трансмембранных участков по последовательности

<https://dtu.biolib.com/DeepTMHMM>

**PDB:2fyn, цепь В**



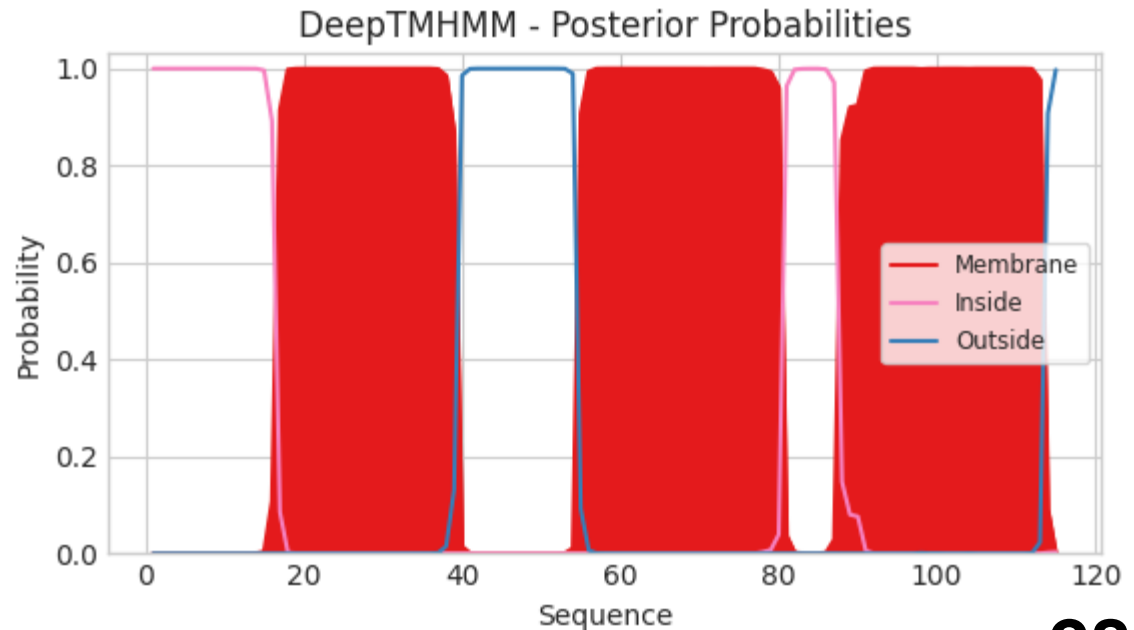
# Пример: сукцинатдегидрогеназа



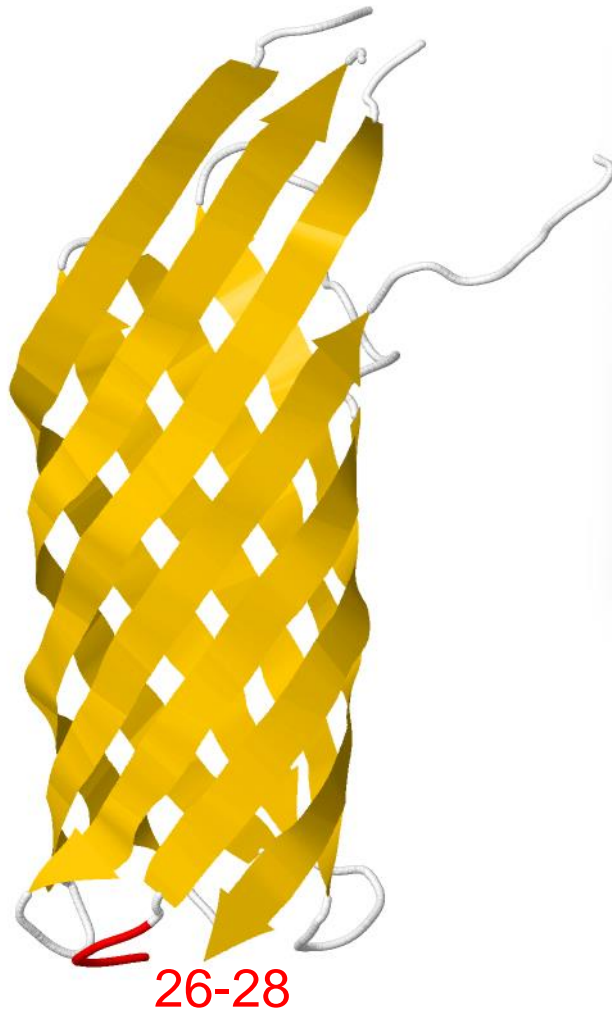
PDB:2wp9, цепь D

## Топология:

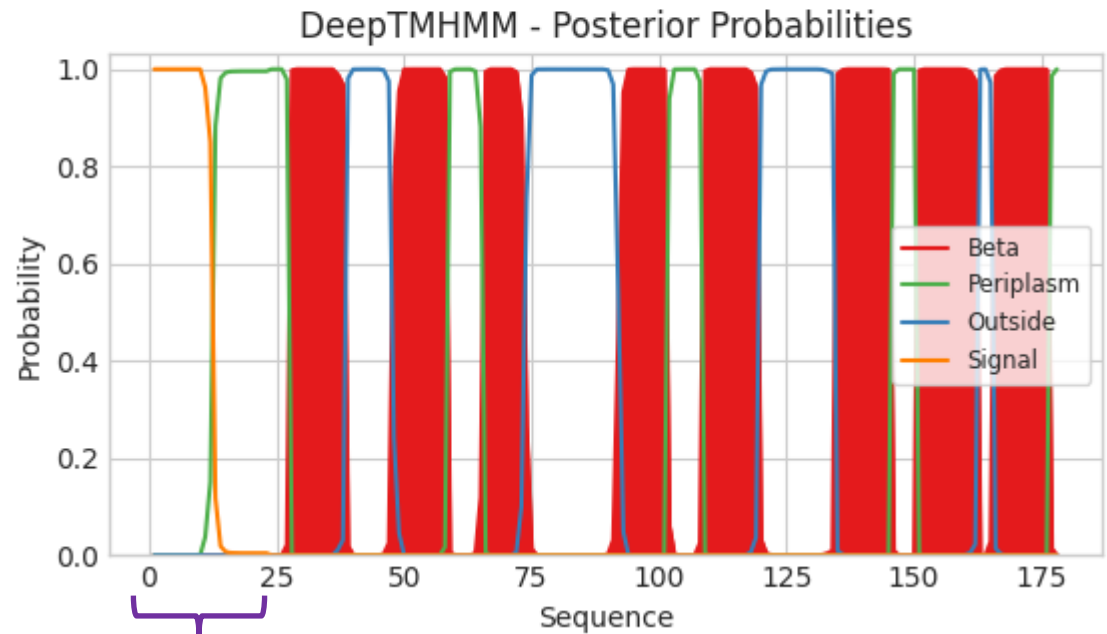
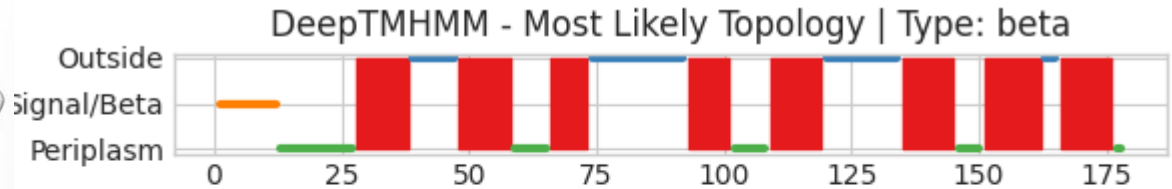
2WP9_4	inside	1	16
<b>2WP9_4</b>	<b>TMhelix</b>	<b>17</b>	<b>39</b>
2WP9_4	outside	40	54
<b>2WP9_4</b>	<b>TMhelix</b>	<b>55</b>	<b>80</b>
2WP9_4	inside	81	87
<b>2WP9_4</b>	<b>TMhelix</b>	<b>88</b>	<b>113</b>
2WP9_4	outside	114	115



# Пример выдачи с сигнальным пептидом



Attachment invasion locus protein (PDB:3qra)

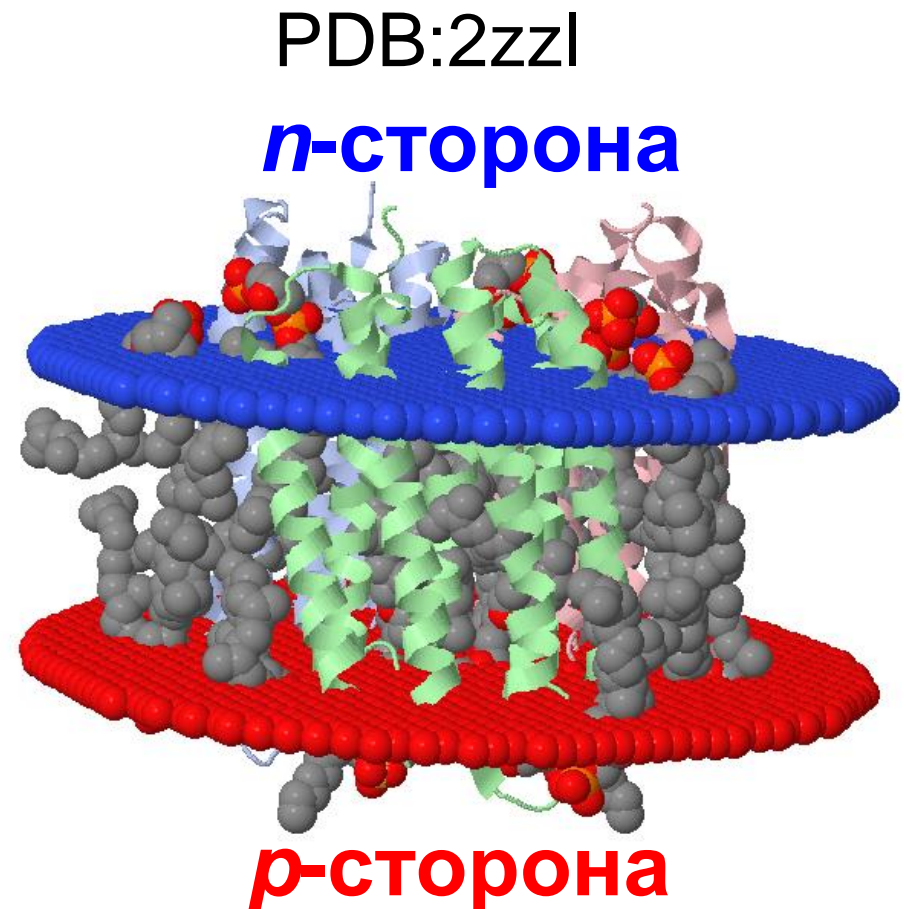


Отрезается,  
в зрелом белке  
нет!

## (Orientation of Proteins in the Membrane)

<http://opm.phar.umich.edu/>

- В базе данных содержатся предсказания о положении белков относительно мембраны
- Есть сервер (PPM) для создания предсказания для любого исходного белка по PDB-файлу



# Полезная справочная информация

orientations of (OPM) database  
proteins in membranes

UNIVERSITY OF MICHIGAN | COLLEGE OF PHARMACY | LOMIZE GROUP

Search proteins by PDB ID or name

**HOME** ABOUT OPM **BIOLOGICAL MEMBRANES** SEARCH DOWNLOAD OPM FILES CONTACT US PPM TMPFOLD SERVER

Protein Classification

- Types (3)
- Classes (11)
- Superfamilies (530)
- Families (1090)
- Species (1056)
- Localizations (24)
- Proteins (8915)


Assembly

- Superfamilies (9)
- Families (19)
- Localizations (8)
- Assemblies (205)

Protein Links

PDB Sum [↗](#), PDB [↗](#), MPKS [↗](#), MPDB [↗](#)

**PPM Server**



## Orientations of Proteins in Membranes (OPM) database

OPM provides spatial arrangements of membrane proteins with respect to the hydrocarbon core of the lipid bilayer.

OPM includes all unique experimental structures of transmembrane proteins and some peripheral proteins and membrane-active peptides (Features).

Each protein is positioned in a lipid bilayer of adjustable thickness and curvature by minimizing its transfer energy from water to the membrane (Methods).

OPM provides structural classification and sorting according to different criteria (Classification).

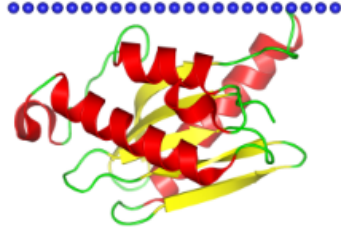
**OPM also provides a few preliminary results of our computational analysis of transmembrane  $\alpha$ -helix association in experimental structures of selected polytopic proteins (Assembly pages).**

*For more information on single-spanning transmembrane proteins please see our Membranome database*

**In citing the Orientations of Proteins in Membranes (OPM) database please refer to**  
Lomize MA, Pogozheva ID, Joo H., Mosberg HI, Lomize AL (2012) OPM database and PPM web server: resources for positioning of proteins in membranes. *Nucleic Acids Res.* **40** (Database issue), D370-D376. [PDF PubMed](#) [↗](#)

**For an explanation of our method please refer to**  
Lomize AL, Pogozheva ID, Lomize MA, Mosberg HI (2006) Positioning of proteins in membranes: A computational approach. *Protein Science.* **15**, 1318-1333. [PDF PubMed](#) [↗](#)

Lomize AL, Pogozheva ID, Mosberg HI (2011) Anisotropic solvent model of the lipid bilayer. 2. Energetics of insertion of small molecules, peptides, and proteins in membranes. *J Chem Inf Model.* **51**, 930-946. [PDF PDF \(supplementary\) PubMed](#) [↗](#)



Synaptobrevin homolog 1 pdb-1iou

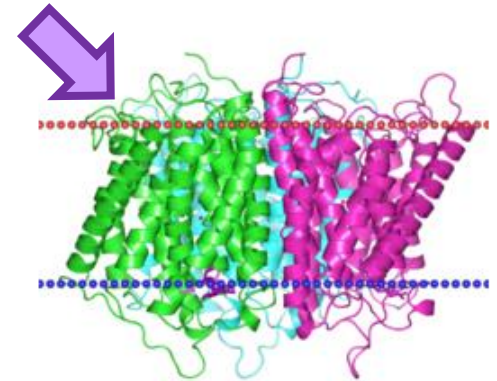
Download File: [1iou.pdb](#)



# Запись в базе данных ORF

## 1u7g » Ammonia Channel

- **Type:** [1. Transmembrane](#) (3 classes)
- **Class:** [1.1. Alpha-helical polytopic](#) (105 superfamilies)
- **Superfamily:** [1.1.017. Ammonia and urea transporters](#) (2 families) [1.A.11 \(TCDB\)](#)
- **Family:** [1.1.17.01. Ammonia transporter Amt](#) (8 proteins) [1.A.11 \(TCDB\)](#)
- **Species:** [Escherichia coli](#) (240 proteins)
- **Localization:** [Bacterial Gram-negative inner membrane](#) (440 proteins)



1u7g » Ammonia Channel	
<b>Hydrophobic Thickness</b>	29.8 ± 1.3 Å
<b>Tilt Angle</b>	0 ± 0°
<b>ΔG<sub>transfer</sub></b>	-148.7 kcal/mol
<b>Links to 1u7g</b>	<a href="#">PDB Sum</a> , <a href="#">PDB</a> , <a href="#">SCOP</a> , <a href="#">MSD</a> , <a href="#">OCA</a> , <a href="#">MMDB</a>
<b>Topology</b>	subunit A (N-terminus out)
<b>Resolution</b>	1.40 Å
<b>Other PDB entries representing this structure</b>	<a href="#">1u77</a> , <a href="#">1u7c</a> , <a href="#">1xqe</a> , <a href="#">1xqf</a> , <a href="#">2nmr</a> , <a href="#">2nop</a> , <a href="#">2now</a> , <a href="#">2npc</a> , <a href="#">2npd</a> , <a href="#">2npe</a> , <a href="#">2npg</a> , <a href="#">2npj</a> , <a href="#">2npk</a> , <a href="#">3c1g</a> , <a href="#">3c1h</a> , <a href="#">3c1i</a> , <a href="#">3c1j</a> , <a href="#">4nh2</a>
<b>Number of TM Secondary Structures</b>	33

3D view in [Jmol](#) or [Webmol](#)

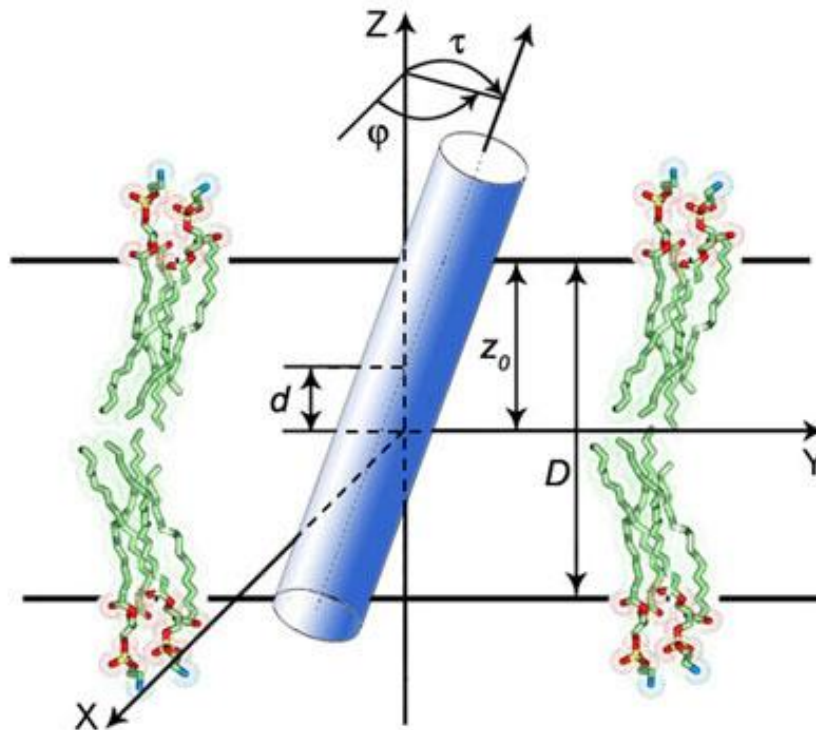
[Download Coordinates](#)

Topology in Bacterial Gram-negative inner membrane

3 transmembrane subunits	
<b>A</b> - Tilt: 7° - Segments:	1(11-32), 2(44-68), 3(98-120), 4(125-149), 5(164-179), 6(200-219), 7(227-251), 8(258-278), 9(281-299), 10(312-333), 11(349-377)
<b>B</b> - Tilt: 7° - Segments:	1(11-32), 2(44-68), 3(98-120), 4(125-149), 5(164-179), 6(200-219), 7(227-251), 8(258-278), 9(281-299), 10(312-333), 11(349-377)
<b>C</b> - Tilt: 7° - Segments:	1(11-32), 2(44-68), 3(98-120), 4(125-149), 5(164-179), 6(200-219), 7(227-251), 8(258-278), 9(281-299), 10(312-333), 11(349-377)

# «Толщина гидрофобной части»

- Толщина мембраны – около 4 нм (40Å).
- Но – это вместе с головками фосфолипидов (а они большие!)
- Величина  $D$  поэтому всегда меньше «табличного» значения

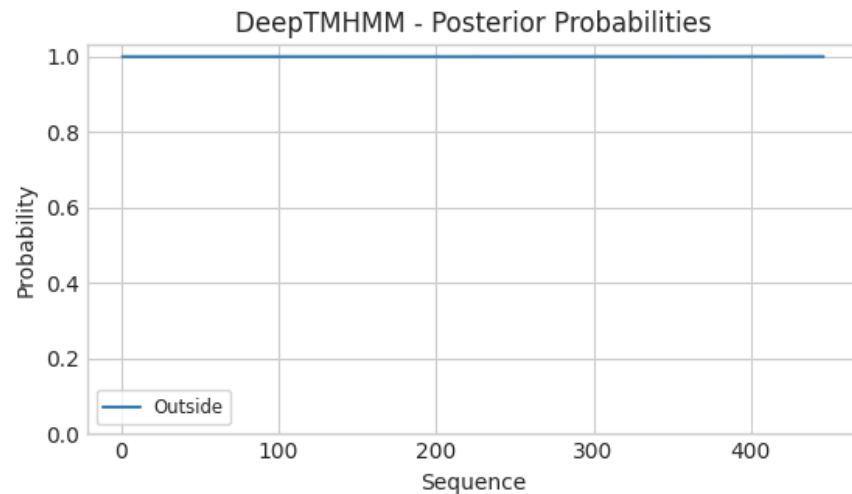
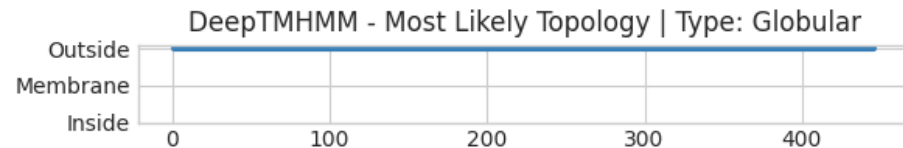
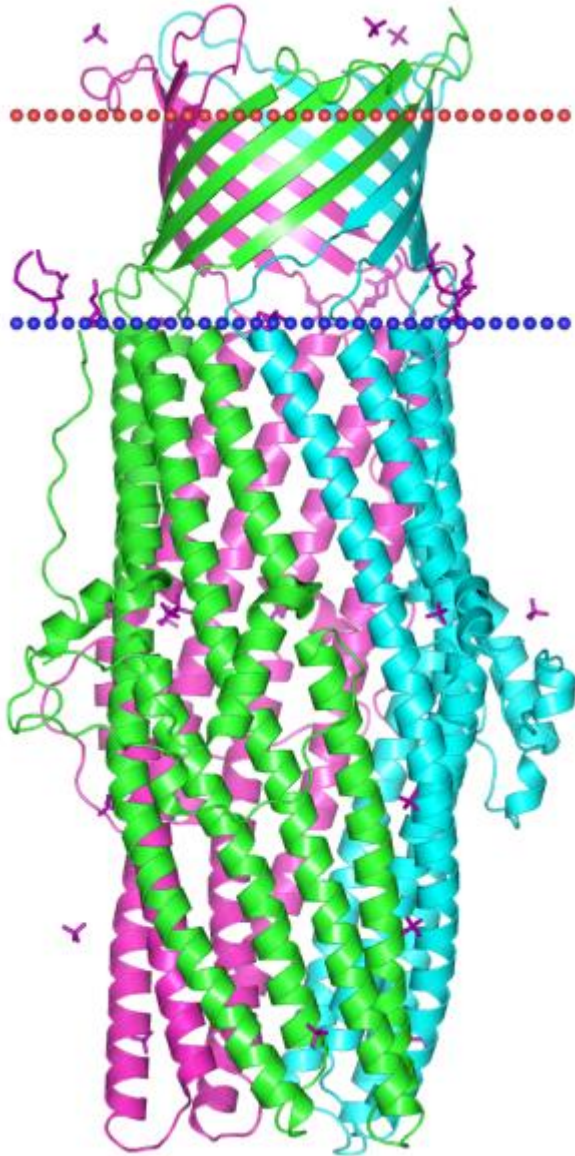


**Figure 1.** Schematic representation of a transmembrane protein in a hydrophobic slab.

$d$ , shift along the bilayer normal;  $D$ , **hydrophobic thickness** ( $D=2z_0$ );  $\phi$ , rotation angle;  $\tau$ , tilt angle.

# DeepTMHMM может ошибаться

Как вы думаете, почему в данном случае DeepTMHMM не смог предсказать трансмембранных участков?



# База данных транспортеров TCDB

<http://www.tcdb.org/>

Полезная база данных: можно найти белки сходные с заданным в базе, почитать про них (со ссылками), посмотреть, т.е. «вытащить» комплекс белков по одной субъединице

## Система классификации ТС (Transport Classification)

TCV.W.X.Y.Z.



Класс, подкласс, Семейство      Субстрат?..

# Классификация в TCDB

**Transporter Classification Database**

Search TCDB: (?)

HOME CONTENTS SUPERFAMILIES **TC-SYSTEM** HELP

TCDB is operated by the Saier Lab Bioinformatics Group

SOFTWARE/TOOLS

- BLAST
- SUBSTRATE SEARCH TOOL
- TMS STATISTICS TOOL
- PSIBLAST
- BIO-TOOLS
- MAPPING FILES
- TC-DOMS

QUICK ACCESS

- STRUCTURE DATA
- HUMAN TRANSPORTERS
- TRANSPORTERS & DISEASES
- PREDICTED EVOLUTIONARY PATHWAYS

**What do you think of TCDB?**

You can [EMAIL](#) us any questions, comments, or suggestions. Alternatively, you can also send us a message through the [CONTACT](#) page of the Saier lab's website.

## Functional and Phylogenetic Classification of Membrane Transport Proteins

The database details a comprehensive [IUBMB](#) approved classification system for membrane transport proteins known as the Transporter Classification (TC) system. The TC system is similar to the IUBMB system of enzymes, except that it incorporates both functional and phylogenetic criteria, and each of these criteria correspond to a type of transporter.

*(you can find more detailed information about the TC system [here](#))*

**Some facts about TCDB:**

- » TCDB is a curated database of factual information
- » The database contains 23500 protein sequences
- » These proteins are classified into 1920 transporter families

[1] Saier MH, Reddy VS, Moreno-Hagelsieb G, Hargrett-Nelson N, Soto A. (2021). The Transporter Classification System: A Comprehensive and Updated Classification of Membrane Transport Proteins. *Nucleic Acids Res.* 49:D111-D121. [19022853]

[2] Saier MH, Reddy VS, Tsu BV, Ahmed MS, Li Y. (2020). Recent advances in membrane transport protein classification. *Nucleic Acids Res.* 48:D111-D121. [3222853]

[3] Saier MH, Reddy VS, Tamang DG, Vastermark L, Soto A. (2019). The Transporter Classification System: A Comprehensive and Updated Classification of Membrane Transport Proteins. *Nucleic Acids Res.* 47:D111-D121. [3222853]

[4] Saier MH Jr, Yen MR, Noto K, Tamang DG, Eddy MR. (2018). The Transporter Classification System: A Comprehensive and Updated Classification of Membrane Transport Proteins. *Nucleic Acids Res.* 46:D111-D121. [3222853]

[5] Saier MH Jr, Tran CV, Barabote RD. (2006). The Transporter Classification System: A Comprehensive and Updated Classification of Membrane Transport Proteins. *Nucleic Acids Res.* 34:D181-6. [16381841]

- 1: Channels/Pores
- 2: Electrochemical Potential-driven Transporters
- 3: Primary Active Transporters
- 4: Group Translocators
- 5: Transmembrane Electron Carriers
- 6: Incompletely Characterized Transport Systems
- 7: Incompletely Characterized Transport Systems
- 8: Accessory Factors Involved in Transport
- 9: Incompletely Characterized Transport Systems

© 2005 - 2024 Saier Lab. | [Contact](#) | [FAQ](#)

TCDB.ORG is maintained by the Saier Lab. Group @ UCSD in collaboration with the SDSC

The text of this website is available for modification and reuse under the terms of the Creative Commons Attribution-Sharealike 3.0 Unported License and the GNU Free Documentation License