**Задание 1**

|  |
| --- |
| **Таблица 1. Описание трансмембранных белков с известной 3D структурой** |
|  |

|  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| **PDB код** | **Тип  (спираль, баррель)** | **Число цепей,  образующих одну ТМ единицу (баррель или набор спиралей)** | **Число трансмембранных участков в ТМ единице** | **Число остатков в одном трансмембранном участке  (типичное, минимальное, максимальное)** | **Толщина мембраны в ангстремах** | **Наклон спиралей/тяжей к нормали** | **Какая мембрана, организм, "код транспортера", функция белка** |
| **1a0s** | баррель | 3 | 18 | Типичное: 10  Минимальное: 6  Максимальное:12 | 23.8 ± 1.1 Å | 0 | TCID=[1.B.3.1.2](http://www.tcdb.org/search/result.php?tc=1.B.3.1.2)  Мембрана: Внешняя клеточная мембранна  Организм:Salmonella typhimurium  Функция: Oligosaccharide porin ScrY |
| **3aeh** | баррель | 1 | 12 | Типичное: 10  Минимальное: 8  Максимальное: 13 | 25.2 ± 1.1 Å | 4 ± 0° | TCDB - 1.B.12 Мембрана: Внешняя мембрана грам-отрицательных бактерий  Организм: Escherichia coli  Функция: гемоглобин связывающая протеаза Hbp |
| **1ek9** | баррель | 3 | По 4 в каждой цепи (12) | Типичное: 11  Минимальное: 9  Максимальное: 13 | 24.6 ± 1.4 Å | 0 ± 2° | TCID= [1.B.17.1.1](http://www.tcdb.org/search/result.php?tc=1.B.17.1.1)  Мембрана: Внешняя мембранна клетки  Организм: Escherichia coli Функция: Экспортер хемолизина, антибиотиков, сидерофоров (энтеробактин) |
| **3ag3**  **(1v55)** | спираль | 20 | A[12] B[2] C[7] D[1] E[0] F[0] G[1] H[0] I[1] J[1] K[1] L[1] M[1] N[12] O[2] P[7] Q[1] R[0] S[0] T[1] U[0] V[1] W[1] X[1] Y[1] Z[1] | Типичное: 20  Минимальное:11  Максимальное:25 | 27.8 ± 0.9 Å | 0 ± 0° | TCID=3.D.4.7.1  Мембрана: Внутренняя мембрана митохондрий  Организм: Bos taurus  Функция: трехкомпонентная система цитохромовой оксидазы |
| **4a01** | спираль | 2 | По 16 (32) | Типичное: 22  Минимальное: 25  Максимальное: 21 | 32.0 ± 0.8 Å | 0 | TCID=[3.A.10](http://www.tcdb.org/search/result.php?tc=3.A.10)  Мембрана: мембрана вакуоли  Организм: [Vigna radiata](http://opm.phar.umich.edu/species.php?species=Vigna%20radiata%20%28Mung%20bean%29)  Функция: Протон-переносящая пирофосфатаза |
| **1a11** | спираль | 1 | 1 | 18 | 24.4 ± 5.6 Å | 17 ± 10° | TCID – не ссылается  Мембрана: цитоплазматическая мембрана эукариот  Организм: [Rattus norvegicus](http://opm.phar.umich.edu/species.php?species=Rattus%20norvegicus)  Функция: альфа-субъединица ацетилхолинового рецептора |

По данным **Lipid Composition Atlas** толщина внутримембранной части ТМ белков значительно варьирует (примерно от 7 до 40 ангстрем) в зависимости от организма и типа мембраны.

**Для архей**: примерно 28-32 ангстрем;

**для внешей мембраны грамм-отрицательных бактерий**: примерно 23-26;

**для внутренней мембраны грамм-отрицательных бактерий**: примерно 28-31;

**для внутренней мембраны митохондрий**: примерно в диапазонах 27-30;

**для плазматической мембраны эукариот** - значения сильно колеблются;

Длина трансмембранных участков баррелей в 2 раза меньше (по числу остатков) длины трансмембранных спиралей за счет более компактной структуры спирали. Длина трансмембранного участка α-спирали около 20 остатков, а баррелей около 10.

**Задание 2**

**Данный мне белок:** C6DHK1

**Гомолог:**3H90(FIEF\_ECOLI)

**Uniprot говорит**: TCDB 2.A.4.; семейство белков, участвующих в диффузии катионов (CDF)

Трансмембранные участки: 11-31; 40-60; 80-101; 114-134; 156-176; 182-202

Локализация: Внутренняя клеточная мембрана

**Выдача TMHMM:**

# uniprot\_C6DHK1\_FIEF\_PECCP Length: 300

# uniprot\_C6DHK1\_FIEF\_PECCP Number of predicted TMHs: 4

# uniprot\_C6DHK1\_FIEF\_PECCP Exp number of AAs in TMHs: 117.99229

# uniprot\_C6DHK1\_FIEF\_PECCP Exp number, first 60 AAs: 43.33616

# uniprot\_C6DHK1\_FIEF\_PECCP Total prob of N-in: 0.97232

# uniprot\_C6DHK1\_FIEF\_PECCP POSSIBLE N-term signal sequence

uniprot\_C6DHK1\_FIEF\_PECCP TMHMM2.0 inside 1 11

uniprot\_C6DHK1\_FIEF\_PECCP TMHMM2.0 TMhelix 12 34

uniprot\_C6DHK1\_FIEF\_PECCP TMHMM2.0 outside 35 37

uniprot\_C6DHK1\_FIEF\_PECCP TMHMM2.0 TMhelix 38 60

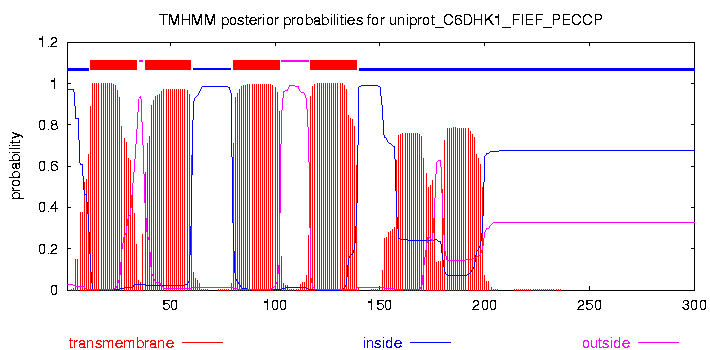
uniprot\_C6DHK1\_FIEF\_PECCP TMHMM2.0 inside 61 79

uniprot\_C6DHK1\_FIEF\_PECCP TMHMM2.0 TMhelix 80 102

uniprot\_C6DHK1\_FIEF\_PECCP TMHMM2.0 outside 103 116

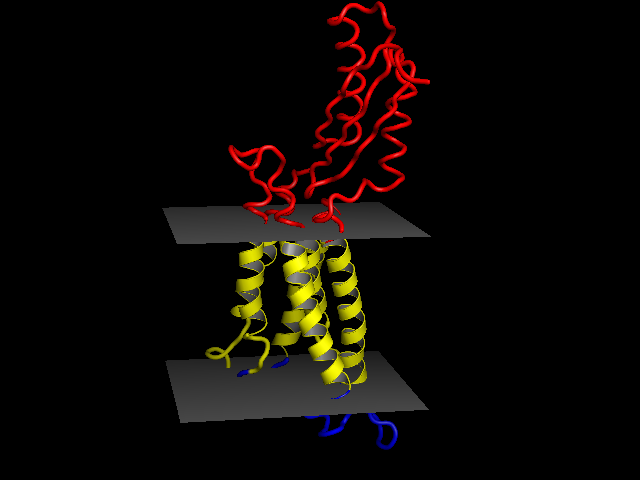
uniprot\_C6DHK1\_FIEF\_PECCP TMHMM2.0 TMhelix 117 139

uniprot\_C6DHK1\_FIEF\_PECCP TMHMM2.0 inside 140 300



Данные, полученные из Uniprot и с помощью TMHMM, не смотря на сходство трансмембранных участков начала последовательности (отличия буквально на один-два аминокислотных остатка), отличаются во второй половине последовательности: TMHMM предсказывает внутриклеточную локализацию N-конца, когда Uniprot предлагает наличие еще двух трансмембранных участков.

**Сравнение с гомологом FIEF\_ECOLI (PDB ID: 3H90)**

Гомолог FIEF\_ECOLI транспортирует железо и отвечает за его детоксикацию, кроме того, может еще транспортировать цинк. Белок является гомодимером, располагается во внутренней мембране клетки. Белок содержит 6 трансмембранных спиралей, 4 домена в цитоплазме и 3 домена в периплазме.   
Структура гомолога:   
  
  
  
Красный- внешнемембранная часть белка;  
Желтый- трансмембранная часть белка;  
Синий- внутримембранная часть белка;

Гомологичный белок имеет 6 трансмембранных участков, 4 из которых очень хорошо совпали с предсказаниями TMHMM. Еще два трансмембранных участка, не предсказанные ранее, но присутствующие в гомологе, достаточно хорошо выравниваются с «моим» белком. Думаю, мой белок имеет 6 трансмембранных участков представленных альфа-спиралями.