**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: 10Минимальное: 6Максимальное: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 мембраннаОрганизм:Salmonella typhimuriumФункция:Oligosaccharide porin ScrY |
| **3aeh** | баррель |   1  |   12 |   Типичное: 10Минимальное: 8Максимальное: 13 |   25.2 ± 1.1 Å |   4 ± 0° |   TCDB - 1.B.12 Мембрана: Внешняя мембрана грам-отрицательных бактерийОрганизм: Escherichia coli Функция: гемоглобин связывающая протеаза Hbp |
| **1ek9** | баррель |   3 | По 4 в каждой цепи (12) | Типичное: 11Минимальное: 9Максимальное: 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 клеткиОрганизм: Escherichia coliФункция: 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: 20Минимальное:11Максимальное:25 |   27.8 ± 0.9 Å |   0 ± 0° |   TCID=3.D.4.7.1Мембрана: Внутренняя мембрана митохондрийОрганизм: Bos taurusФункция: трехкомпонентная система цитохромовой оксидазы |
| **4a01** | спираль |   2 |   По 16 (32) |   Типичное: 22Минимальное: 25Максимальное: 21 |   32.0 ± 0.8 Å |   0 |   TCID=[3.A.10](http://www.tcdb.org/search/result.php?tc=3.A.10) Мембрана: мембрана вакуолиОрганизм: [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 ссылаетсяМембрана: цитоплазматическая мембрана эукариотОрганизм: [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.