

## 1. Знакомство с OPM

В основе классификации в базе Orientations of Proteins in Membranes (OPM) лежит расположение белка относительно мембраны. Все белки делятся на трансмембранные, периферические и мембрано-активные пептиды. Далее классификация организована следующим образом:

- класс - архитектура или способ укладки белковой цепи внутри мембраны (альфа-спирали, бета-листы)
- семейство - по структурному сходству и общему эволюционному происхождению
- подсемейство - высокий уровень схожести пространственной укладки

В описании белка в OPM присутствуют ссылки на другие базы данных: PDB, UniProt, TCDB, Pfam/InterPro, NCBI.

С помощью поиска по уровням классификации в базе данных OPM нашли белок, содержащий  $\beta$ -листы в трансмембранном домене - бактериальный канал секреции амилоида CsgG(7brm). CsgG — это липопротеиновый компонент, который формирует канал секреции в наружной мембране бактерий (например, *E. coli*), необходимый для транспорта субъединиц амилоидов из клетки во внешнюю среду. Амилоиды у бактерий — это белковые функциональные фибриллы, которые необходимы для образования биопленок, защиты клеток и взаимодействия с окружающей средой.

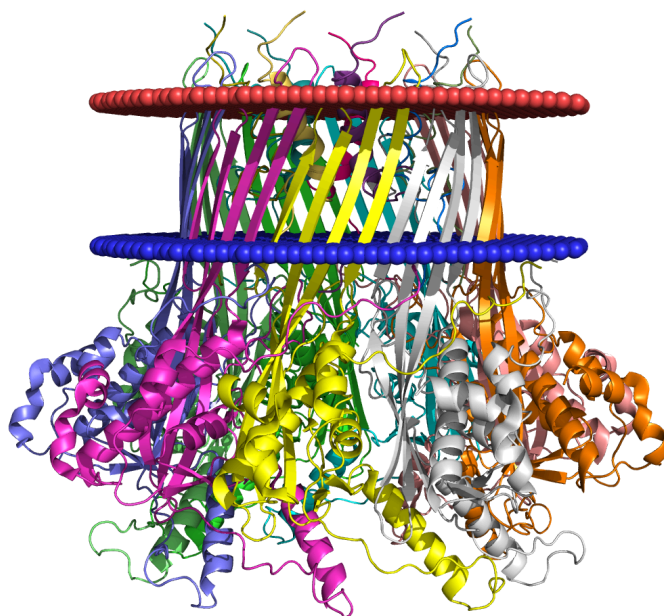


Рис1. Рибол структура бактериального канала секреции амилоида CsgG(7brm). Красный - наружная сторона мембраны, синий — цитоплазматическая.

## 2. Предсказание трансмембранных участков белка двумя сервисами

Название исследуемого белка: Mitochondrial ABC transporter

ABCB10(Митохондриальный ABC-транспортер)

PDB id: 4aux

UniProt идентификатор: Q9NRK6 · ABCBA\_HUMAN

Организм: человек

Локализация: внутренняя мембрана митохондрий

Функция: АТФ-зависимый транспортер, расположенный во внутренней мембране митохондрий, катализирует экспорт биливердина из митохондриального матрикса и играет решающую роль в синтезе гемоглобина и антиоксидантной защите.

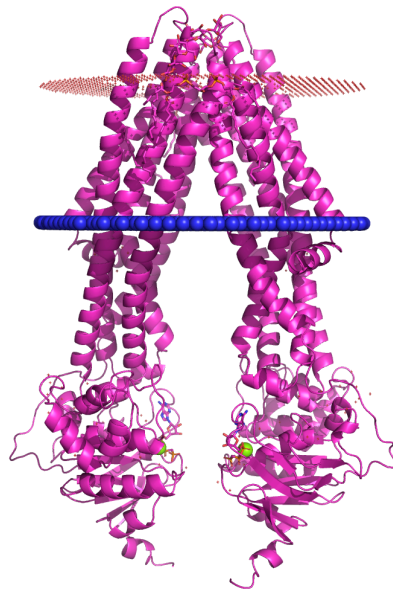


Рис2. Рибон структура митохондриального ABC-транспортера(4aux). Красный - наружная сторона мембраны, синий — цитоплазматическая.

ОПМ координаты трансмембранных участков белка на цепи А и В:

А - Tilt: 3 - TM segments: 1( 169- 192), 2( 214- 236), 3( 288- 310), 4( 314- 333), 5( 393- 416), 6( 431- 452)

В - Tilt: 3 - TM segments: 1( 169- 192), 2( 214- 236), 3( 288- 310), 4( 314- 333), 5( 393- 416), 6( 431- 452)

Последовательность белка взяли из UniProt:

<https://rest.uniprot.org/uniprotkb/Q9NRK6.fasta>

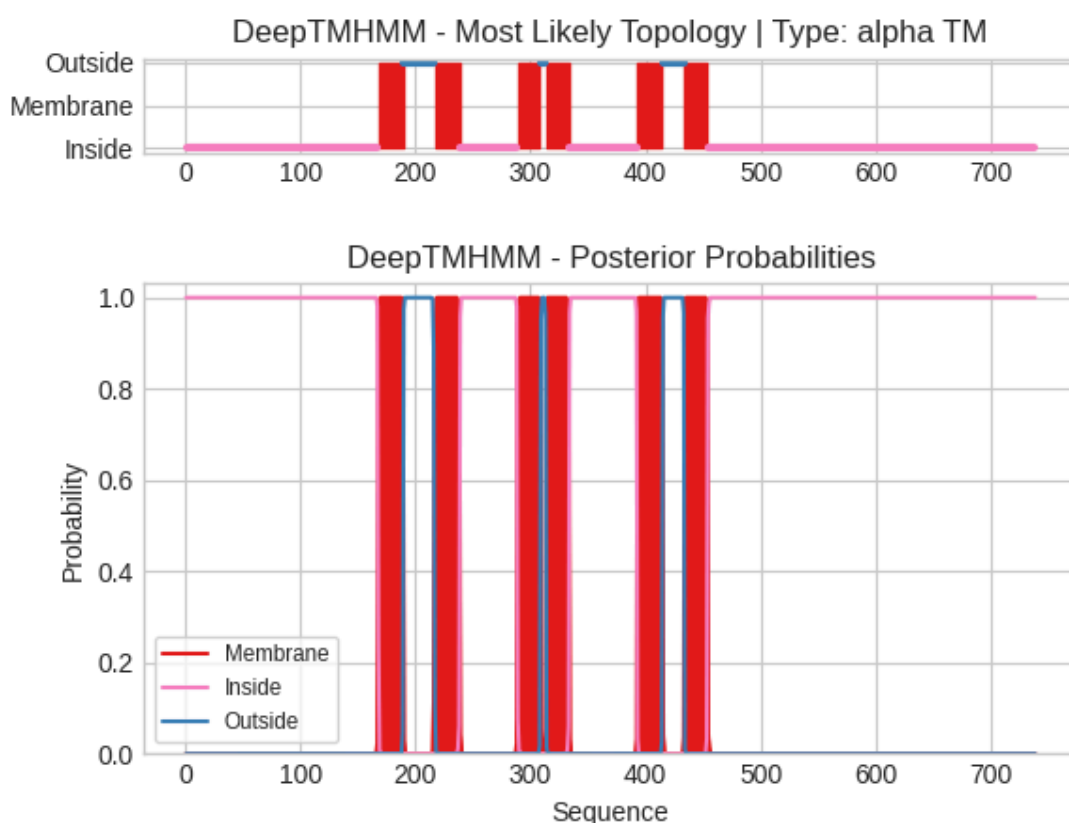


Рис3. Результат выдачи DeepTMHMM для белка 4aux. В верхней части показана наиболее вероятная топология белка; в нижней части отображены вероятности топологий. На нижнем графике можно увидеть вероятности нахождения альфа-спирали в периплазме, внутри клетки и во внутренней мембране

#### DeepTMHMM координаты трансмембранных участков белка

```
# sp_Q9NRK6_ABCBA_HUMAN Length: 738
# sp_Q9NRK6_ABCBA_HUMAN Number of predicted TMRs: 6
sp_Q9NRK6_ABCBA_HUMAN TMhelix 168 189
sp_Q9NRK6_ABCBA_HUMAN TMhelix 217 238
sp_Q9NRK6_ABCBA_HUMAN TMhelix 289 308
sp_Q9NRK6_ABCBA_HUMAN TMhelix 314 333
sp_Q9NRK6_ABCBA_HUMAN TMhelix 393 414
sp_Q9NRK6_ABCBA_HUMAN TMhelix 434 453
```

Таблица1. Сравнение предсказаний трансмембранных участков

OPM координаты	DeepTMHMM координаты
169-192	168-189

214-236	217-238
288-310	289-308
314-333	314-333
393-416	393-414
431-452	434-453

Как видим, предсказания практически полностью совпали, всего в нескольких участках есть сдвиг на пару аминокислотных позиций. Обе программы предсказали 6 трансмембранных участков и их различия в пределах +/- 5 аминокислот.