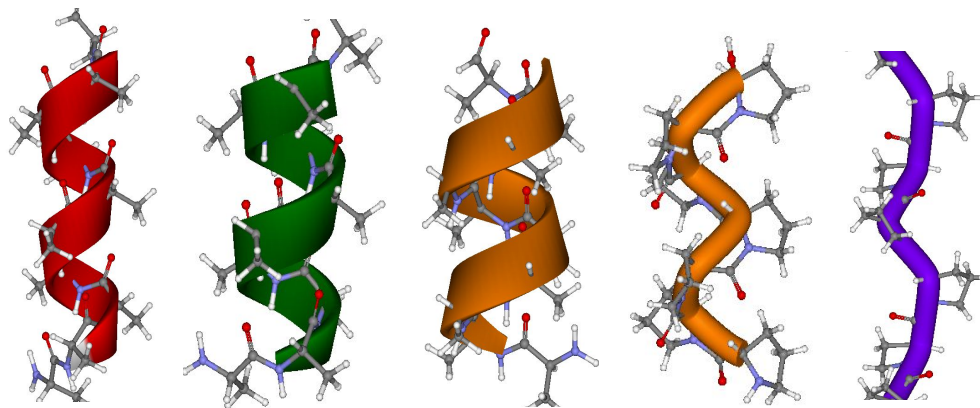


ЕЛЕМЕНТИ ВТОРИННОЇ СТРУКТУРИ ПЕПТИДІВ І БІЛКІВ



а)

б)

в)

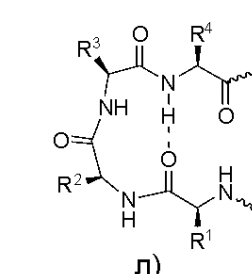
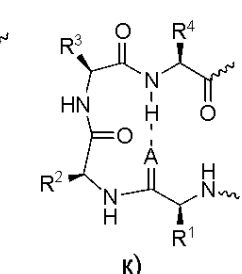
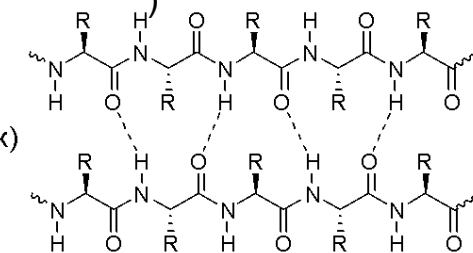
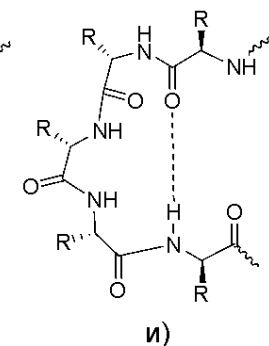
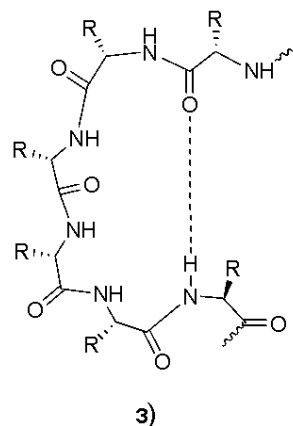
г)

д)

а) 3_{10} -спіраль (права);
 б) α -спіраль (права);
 в) π -спіраль (права);
 г) спіраль PP I (права);
 д) спіраль PP II (ліва);
 е) антипаралельна
 β -складчата структура;
 ж) паралельна
 β -складчата структура;
 з) π -вигін; и) α -вигін;
 к) β -вигін I типу;
 и) β -вигін II типу;
 м) γ -вигін.

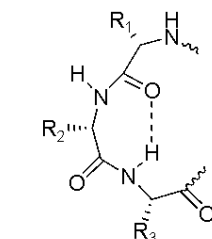
е)

ж)

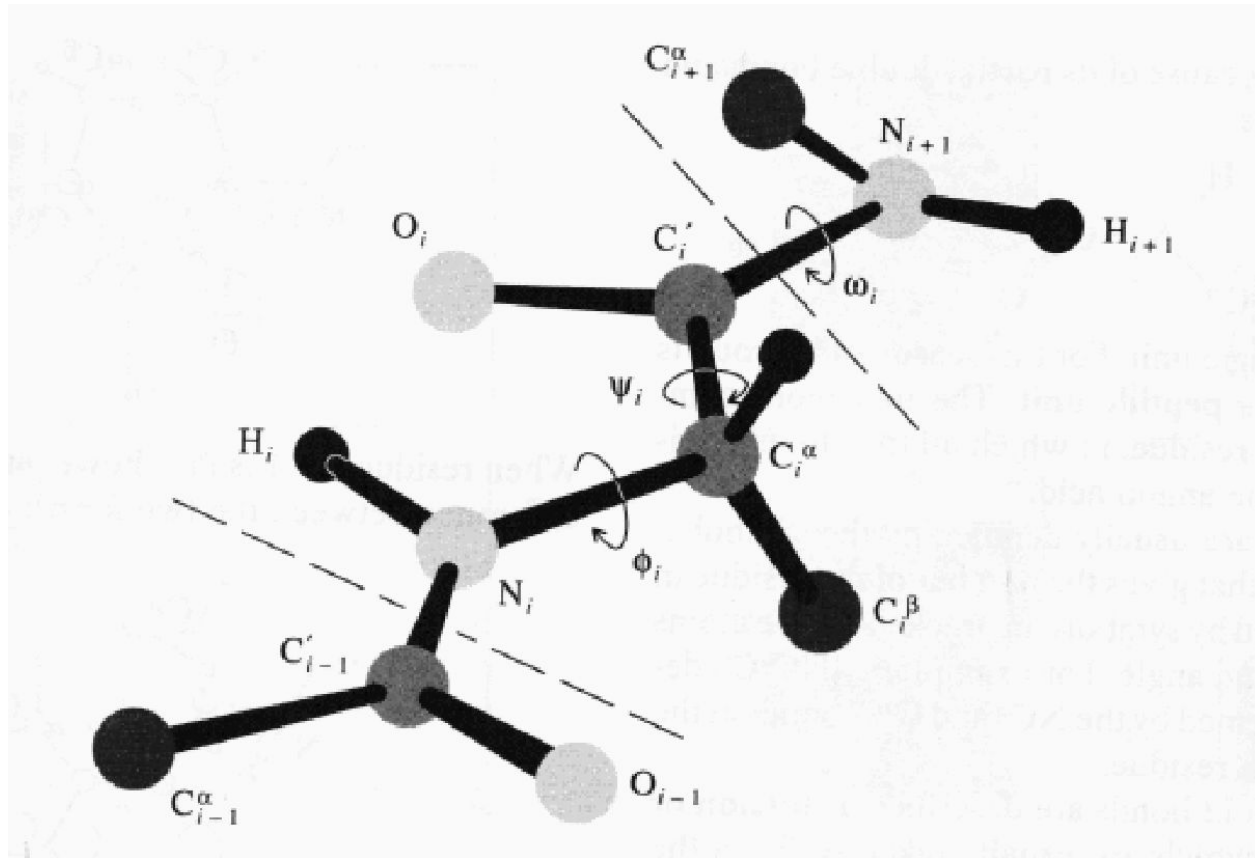


л)

м)



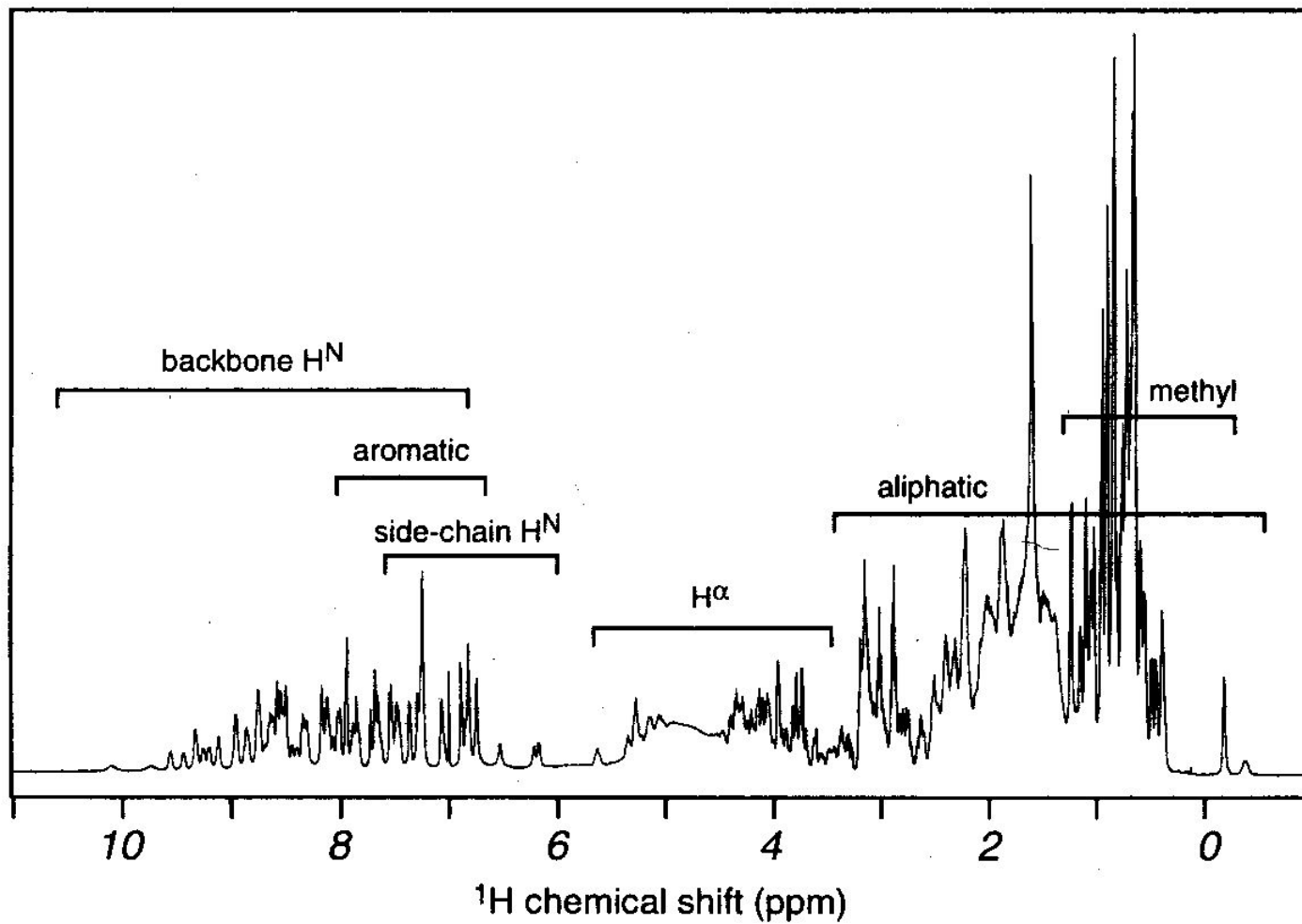
КУТИ, ЯКІ ОПИСУЮТЬ КОНФОРМАЦІЮ ПОЛІПЕПТИДНОГО ЛАНЦЮГА



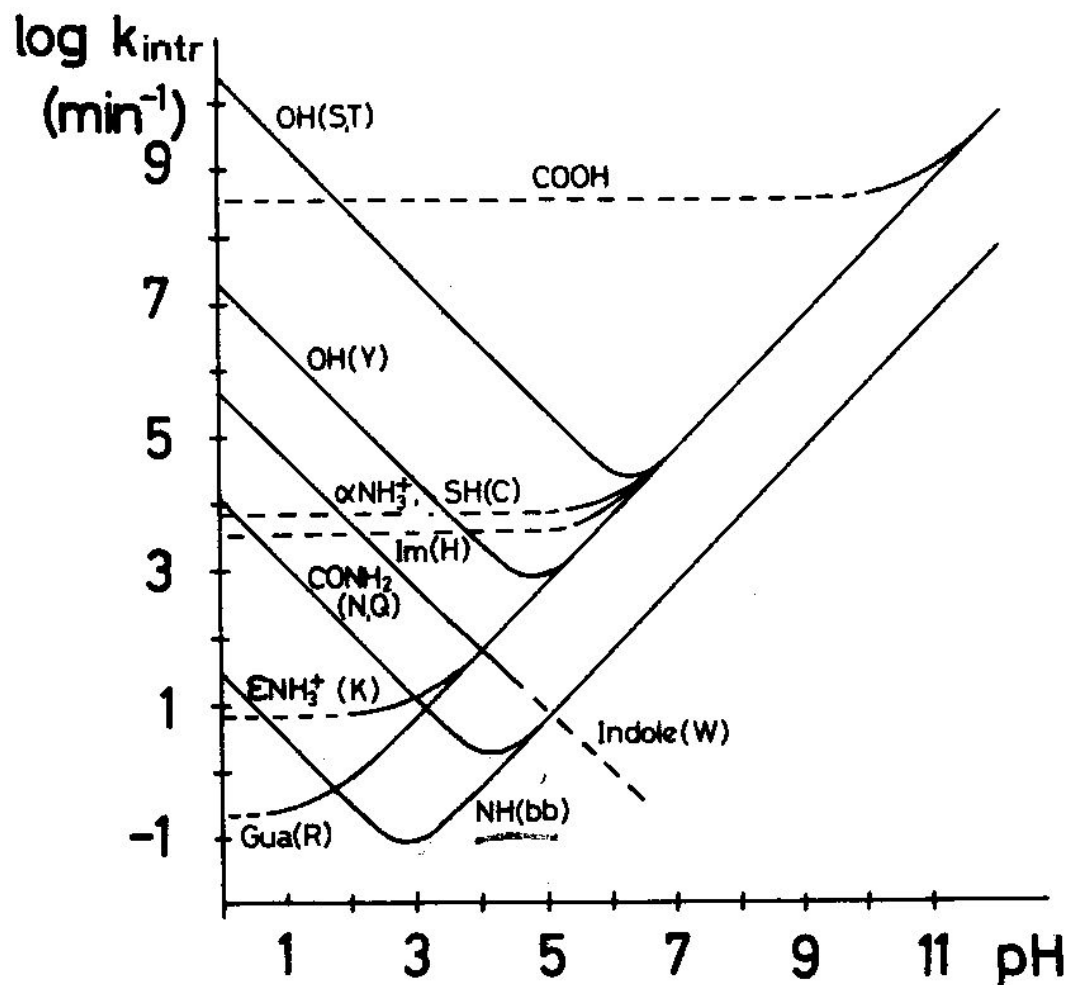
ТИПОВІ ЗНАЧЕННЯ КУТІВ, ЩО ОПИСУЮТЬ КОНФОРМАЦІЮ ПОЛІПЕПТИДНОГО ЛАНЦЮГА ДЛЯ РІЗНИХ ЕЛЕМЕНТІВ ВТОРИННОЇ СТРУКТУРИ

Елемент вторинної структури	ϕ	ψ	ω
3_{10} -спіраль	-60	-30	+180
α -спіраль	-57	-47	+180
π -спіраль	-55	-76	+180
спіраль поліпроліну I (PP I)	-83	+158	0
спіраль поліпроліну II (PP II)	-76	+146	+180
паралельна β -складчата структура	-119	+113	—
антипаралельна β -складчата структура	-139	+135	—
β -вигини*	ϕ_{i+1}	ψ_{i+1}	ϕ_{i+2}
тип I	-60	-30	-90
тип I'	+60	+30	+90
тип II	-60	+120	+80
тип II'	+60	-120	-80
тип III	-60	-30	-60
тип III'	+60	+30	+60

^1H -ЯМР СПЕКТР УБІКВІТІНУ

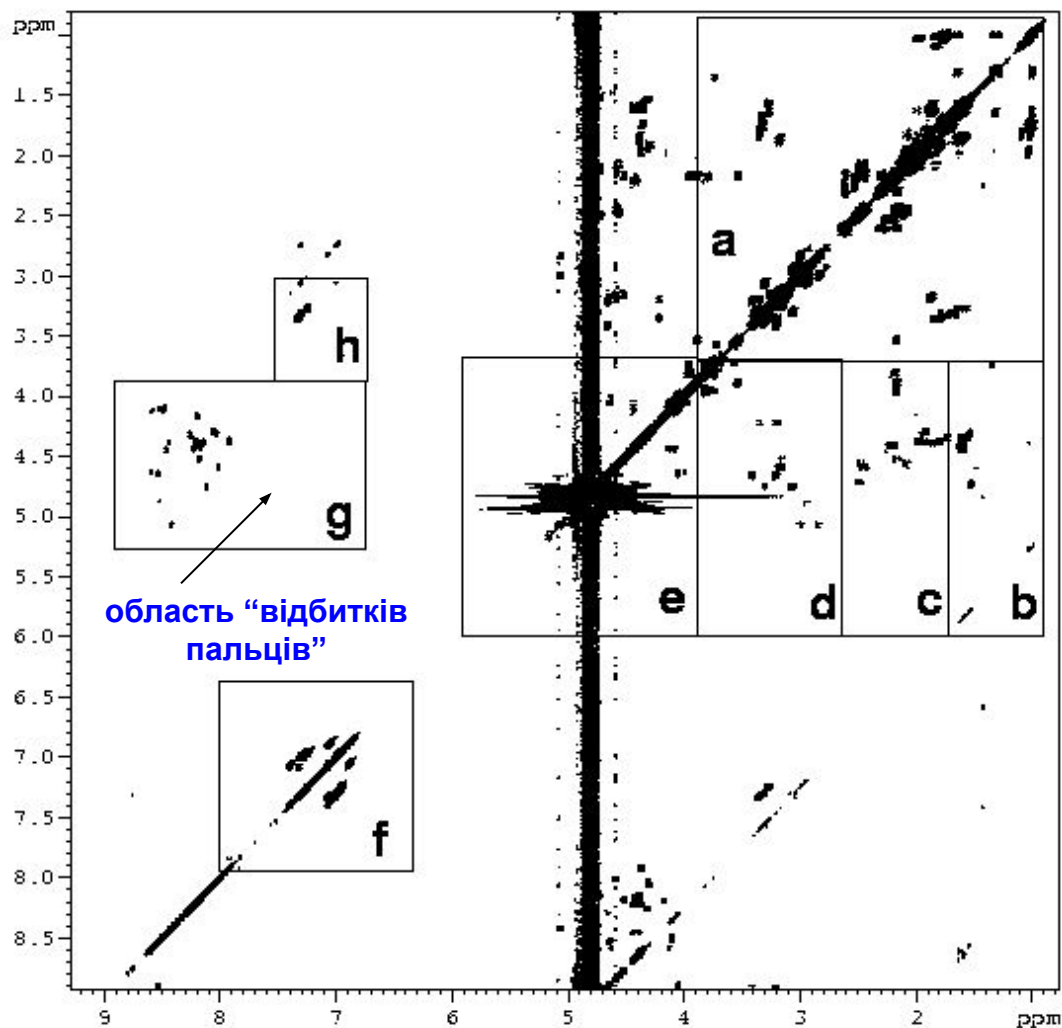


ЗАЛЕЖНІСТЬ ШВИДКОСТІ ОБМІНУ NH ПРОТОНІВ ВІД pH

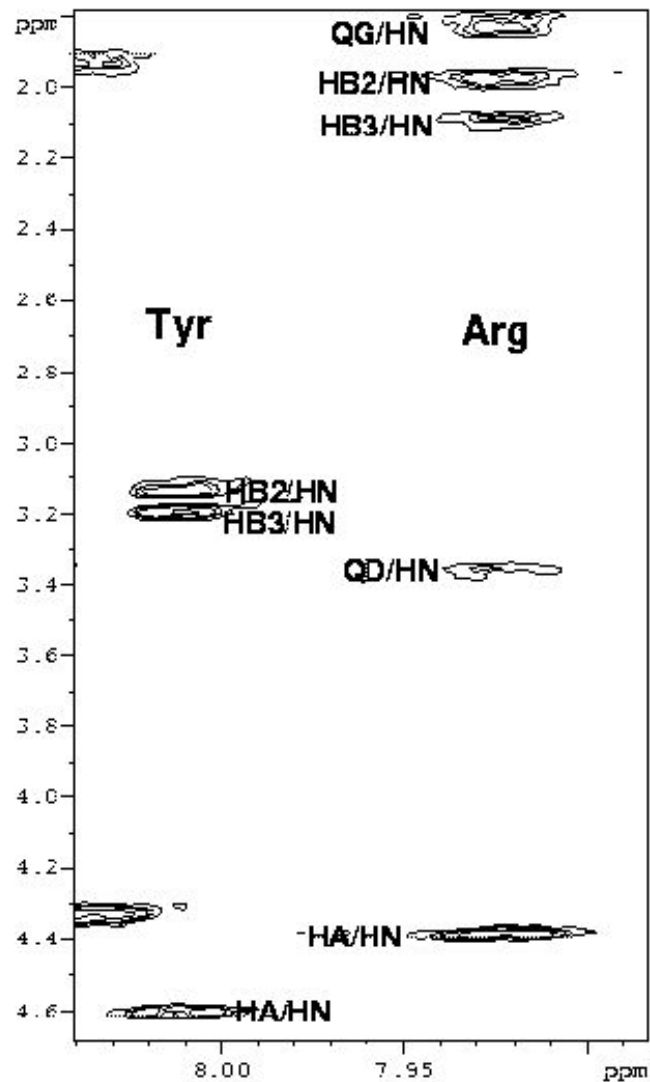


НАЙВАЖЛИВІШІ КОРЕЛЯЦІЇ В COSY СПЕКТРАХ ПЕПТИДІВ

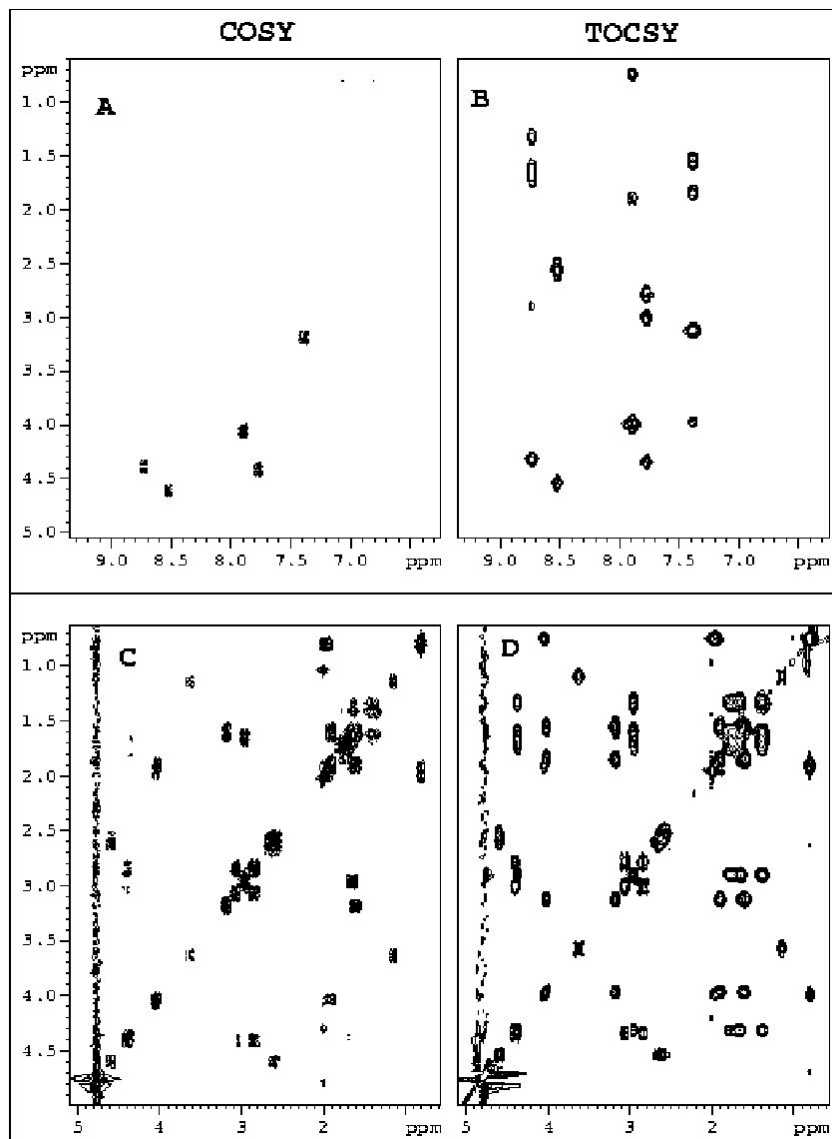
- a) всі нелабільні неароматичні протони бокових ланцюгів (крім $\beta\text{H}-\gamma\text{CH}_3$ Thr, $\delta\text{H}-\delta\text{H}$ Pro, $\beta\text{H}-\beta\text{H}$ Ser;
- b) $\alpha\text{H}-\beta\text{CH}_3$ Ala, $\beta\text{H}-\gamma\text{CH}_3$ Thr;
- c) $\alpha\text{H}-\beta\text{H}$ Val, Leu, Ile, Glu, Gln, Met, Pro, Arg, Lys;
- d) $\alpha\text{H}-\beta\text{H}$ Cys, Asp, Asn, Phe, Tyr, His, Trp;
- e) $\alpha\text{H}-\alpha\text{H}$ Gly, $\alpha\text{H}-\beta\text{H}$ Thr, $\delta\text{H}-\delta\text{H}$ Pro, $\alpha\text{H}-\beta\text{H}$, $\beta\text{H}-\beta\text{H}$ Ser;
- f) ароматичні протони, бокові ланцюги Asn, Gln;
- g) $\text{NH}-\alpha\text{H}$;
- h) $\delta\text{CH}_2-\varepsilon\text{NH}$ Arg.



ТОССУ КОРЕЛЯЦІЇ – ВИЯВЛЕННЯ ОКРЕМИХ СПІНОВИХ СИСТЕМ

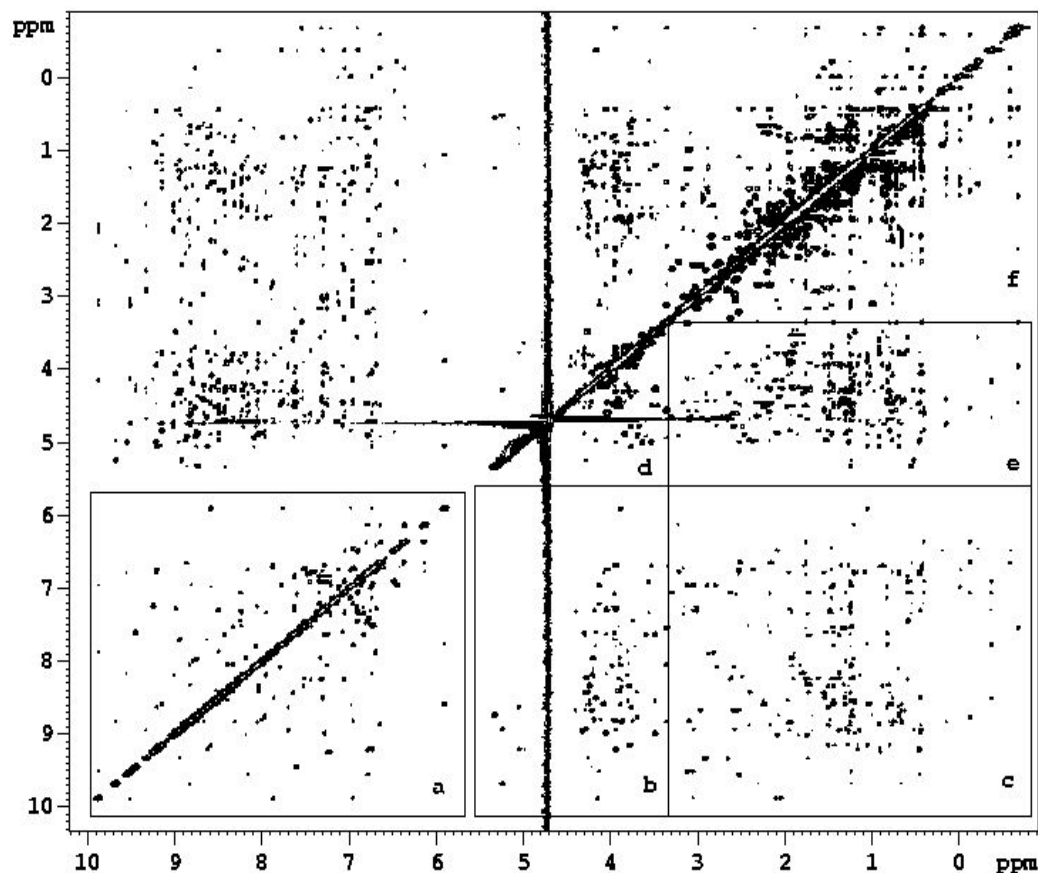


ПОРІВНЯННЯ TOCSY ТА COSY на прикладі кореляцій амідних та аліфатичних протонів



НАЙВАЖЛИВІШІ КОРЕЛЯЦІЇ В NOESY СПЕКТРАХ ПЕПТИДІВ

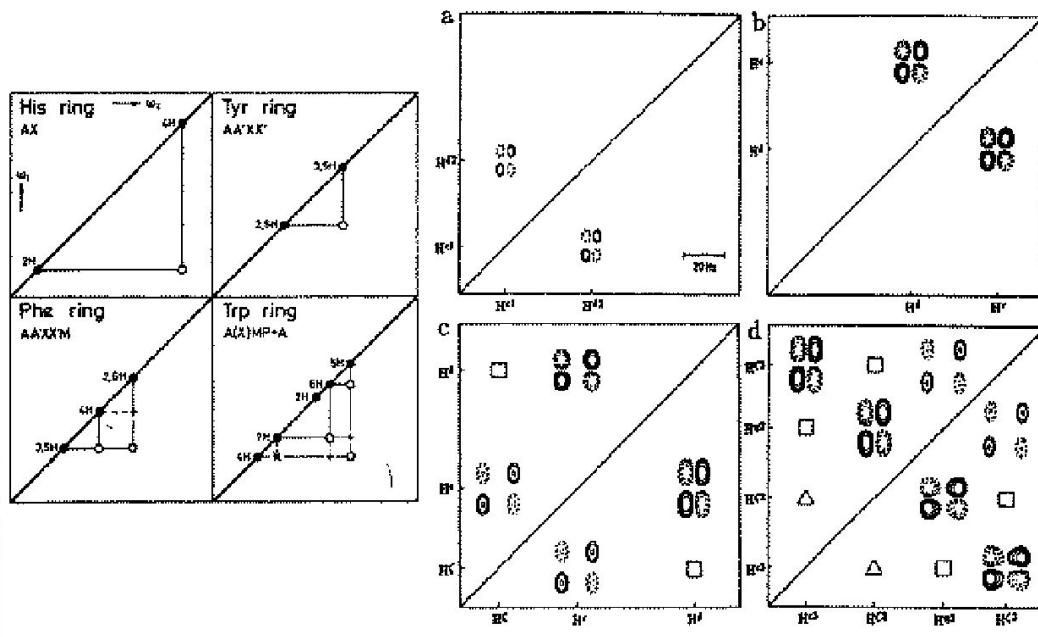
- a) NH, NH-ароматичні, аром.-аром.;
- b) NH, аром.- α H, δ H Ser, β H Ser, Thr;
- c) NH, аром.-аліф.;
- d) α H, δ H Pro, β H Ser, Thr- α H, δ H Pro;
- e) α H, δ H Pro; β H Ser, Thr-аліф.;
- f) аліф.-аліф.



СТРАТЕГІЇ ВІДНЕСЕННЯ ПІКІВ В СПЕКТРАХ ПЕПТИДІВ

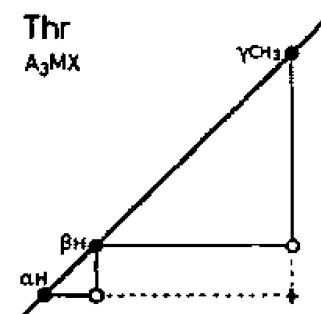
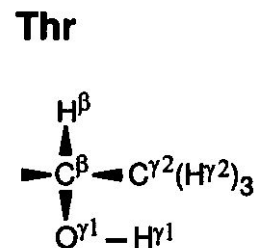
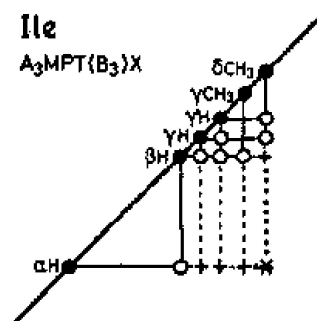
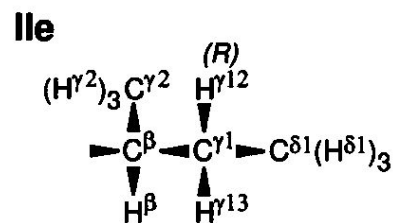
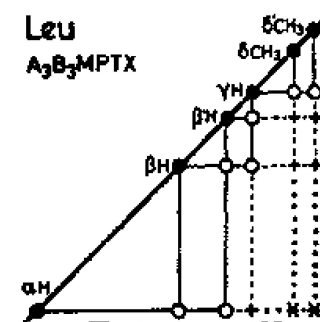
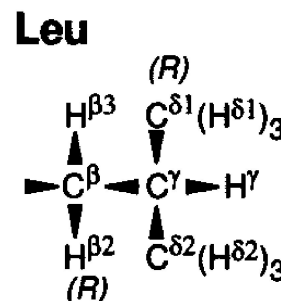
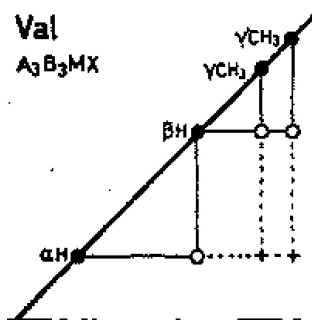
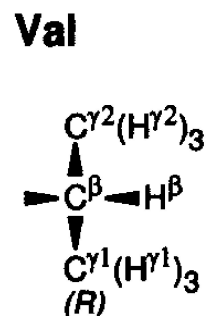
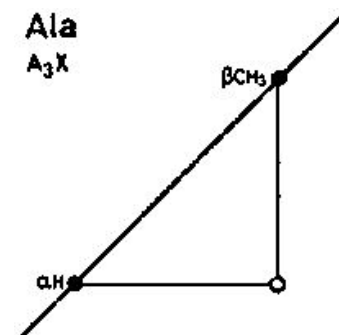
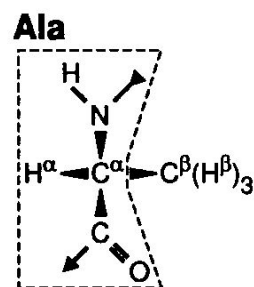
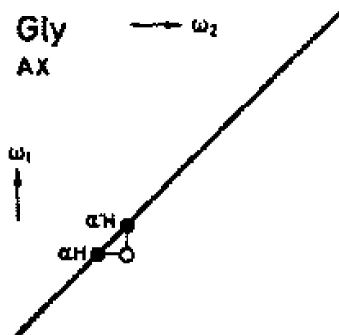
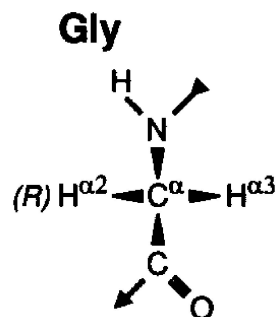
- оптимізація умов ЯМР-експериментів
- ідентифікація спінових систем (TOCSY, COSY):
враховується кількість протонів в спінових системах та характеристичні хімічні зсуви

спінові системи ароматичних замісників



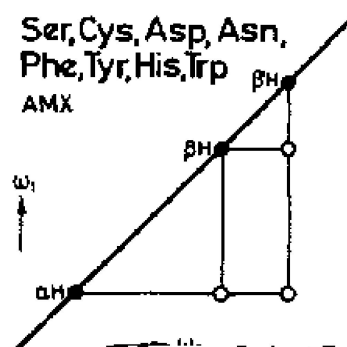
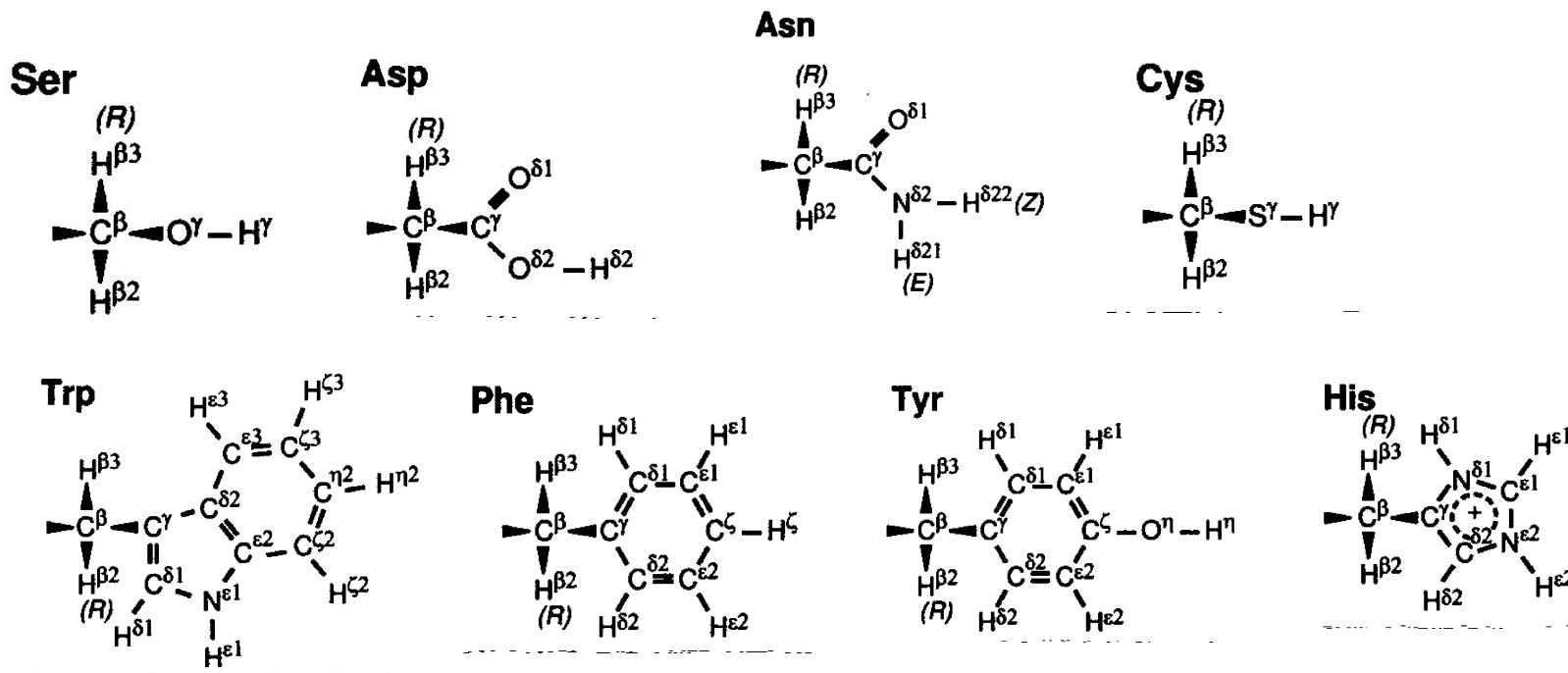
СТРАТЕГІЇ ВІДНЕСЕННЯ ПІКІВ В СПЕКТРАХ ПЕПТИДІВ

спінові системи бічних ланцюгів



СТРАТЕГІЇ ВІДНЕСЕННЯ ПІКІВ В СПЕКТРАХ ПЕПТИДІВ

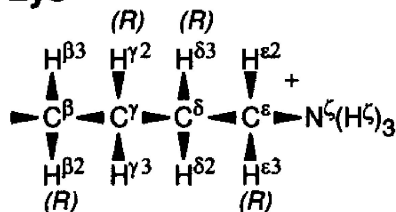
спінові системи бічних ланцюгів



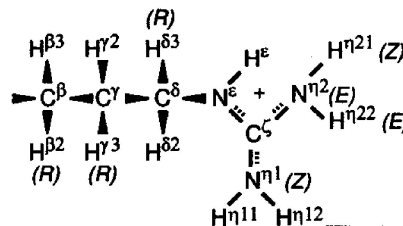
СТРАТЕГІЇ ВІДНЕСЕННЯ ПІКІВ В СПЕКТРАХ ПЕПТИДІВ

спінові системи бічних ланцюгів

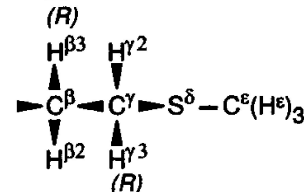
Lys



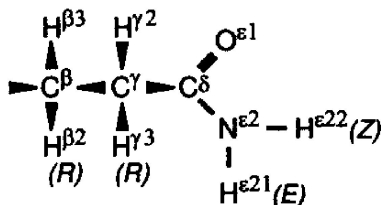
Arg



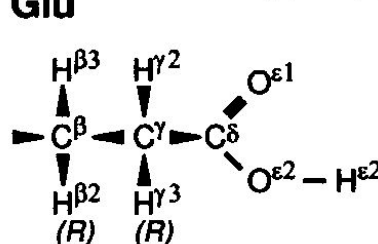
Met



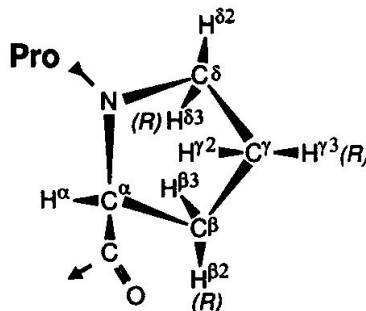
Gln



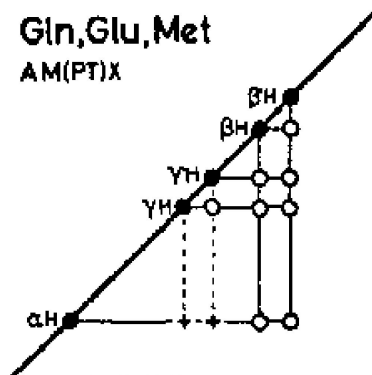
Glu



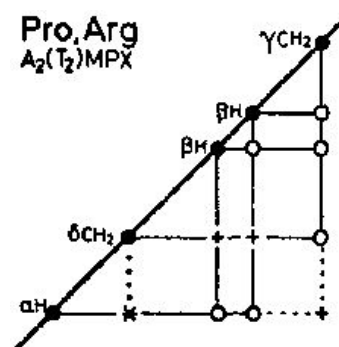
Pro



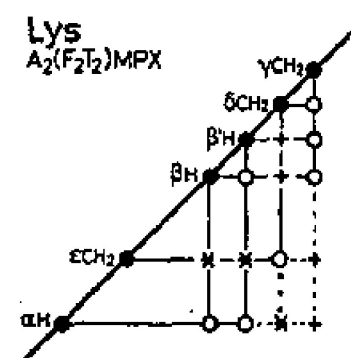
Gln, Glu, Met
AM(PT)X



Pro, Arg
A2(T2)MPX



Lys
A2(F2T2)MPX



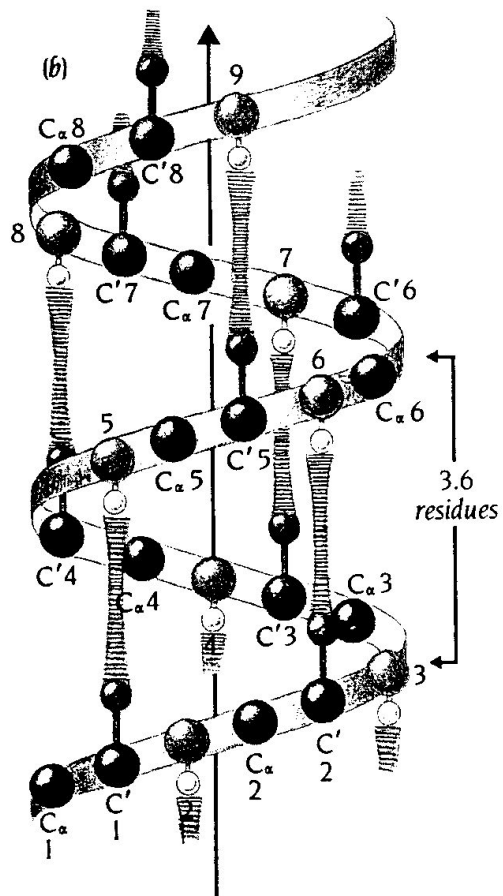
СТРАТЕГІЇ ВІДНЕСЕННЯ ПІКІВ В СПЕКТРАХ ПЕПТИДІВ

типові хімічні зсуви для random coil
пептидів

залишок	NH	Ha	Hβ	інші протони
Ala	8.24	4.32	1.39	
Cys(red)	8.32	4.55	2.93, 2.93	
Cys(ox)	8.43	4.71	3.25, 2.99	
Asp	8.34	4.64	2.72, 2.65	
Glu	8.42	4.35	2.06, 1.96	γCH_2 2.31, 2.31
Phe	8.30	4.62	3.14, 3.04	2,6H 7.28; 3,5H 7.38; 4H 7.32
Gly	8.33	3.96		
His	8.42	4.73	3.29, 3.16	2H 8.58; 4H 7.29
Ile	8.00	4.17	1.87	γCH_2 1.45, 1.16; γCH_3 0.91; δCH_3 0.86
Lys	8.29	4.32	1.84, 1.75	γCH_2 1.44, 1.44; δCH_2 1.68, 1.68; ϵCH_2 2.99, 2.99; ϵNH_3^+ 7.81
Leu	8.16	4.34	1.62, 1.62	γCH 1.59; δCH_3 0.92, 0.87
Met	8.28	4.48	2.11, 2.01	γCH_2 2.60, 2.54; ϵCH_3 2.10
Asn	8.40	4.74	2.83, 2.75	γNH_2 7.59, 6.91
Pro	-	4.42	2.29, 1.94	γCH_2 2.02, 2.02; δCH_2 3.63, 3.63
Gln	8.32	4.34	2.12, 1.99	γCH_2 2.36, 2.36; δNH_2 7.52, 6.85
Arg	8.23	4.34	1.86, 1.76	γCH_2 1.63, 1.63; δCH_2 3.20, 3.20; ϵNH 8.07
Ser	8.31	4.47	3.89, 3.87	
Thr	8.15	4.35	4.24	γCH_3 1.21
Val	8.03	4.12	2.08	γCH_3 0.94, 0.93
Trp	8.25	4.66	3.29, 3.27	2H 7.27; 4H 7.65; 5H 7.18; 6H 7.25; 7H 7.50
Tyr	8.12	4.55	3.03, 2.98	2,6H 7.14; 3,5H 6.84

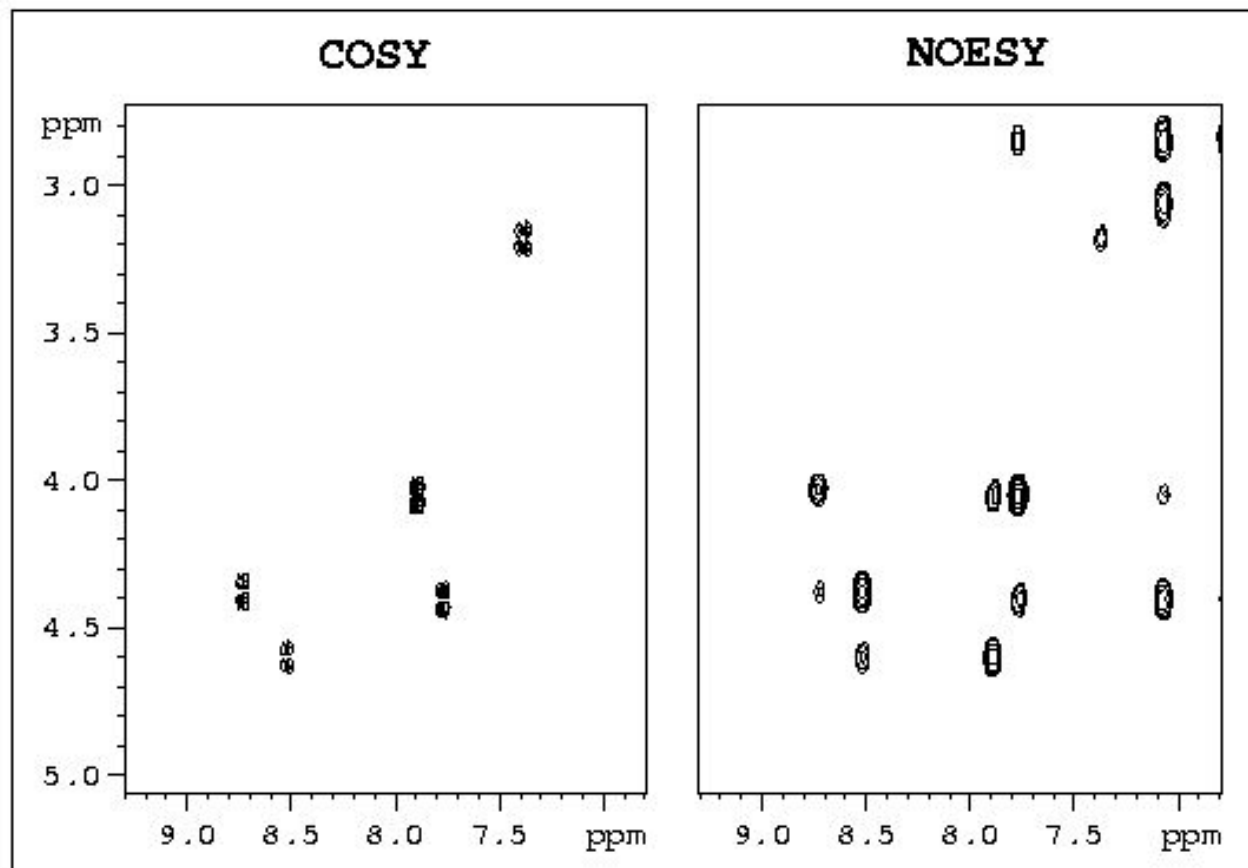
ВСТАНОВЛЕННЯ АМІНОКИСЛОТНОЇ ПОСЛІДОВНОСТІ

-аналіз NOESY спектрів



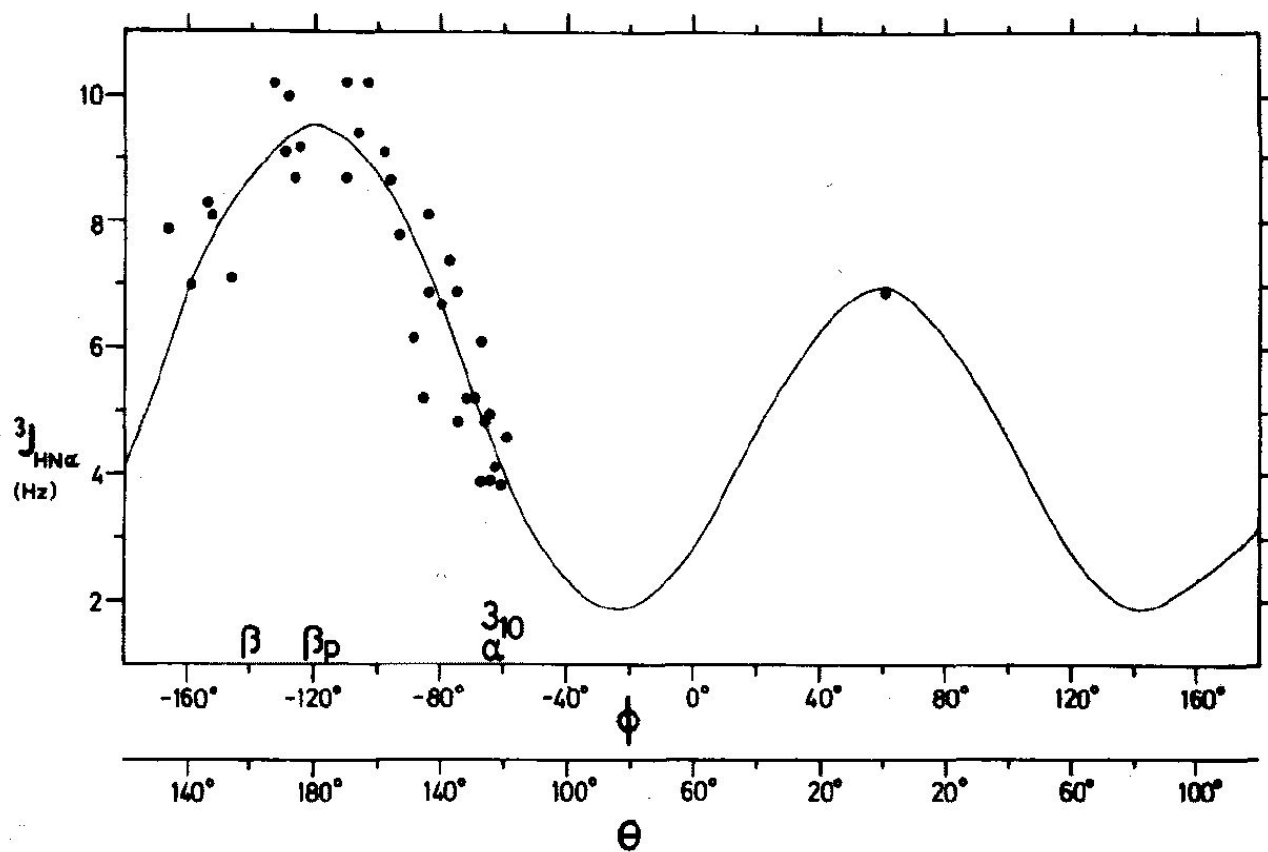
ВСТАНОВЛЕННЯ АМІНОКИСЛОТНОЇ ПОСЛІДОВНОСТІ

-аналіз NOESY + COSY спектрів



ВСТАНОВЛЕННЯ КОНФОРМАЦІЇ ПОЛІПЕПТИДНОГО ЛАНЦЮГА

-аналіз $^3J_{\text{NH}-\alpha\text{CH}}$



ВСТАНОВЛЕННЯ КОНФОРМАЦІЇ ПОЛІПЕПТИДНОГО ЛАНЦЮГА

-аналіз $^3J_{\text{NH}-\alpha\text{CH}}$

ТЕОРЕТИЧНІ ЗНАЧЕННЯ $^3J_{\text{HN}-\alpha\text{H}}$ ДЛЯ ТИПОВИХ
ЕЛЕМЕНТІВ ВТОРИННОЇ СТРУКТУРИ ПЕПТИДІВ

ЕЛЕМЕНТ	θ	$^3J_{\text{HN}-\text{Ah}}$
α -спіраль	-57°	3.9 Hz
3_{10} -спіраль	-60°	4.2 Hz
антипаралельна		
β -складчата структура	-139°	8.9 Hz
паралельна		
b-складчата структура	-119°	9.7 Hz

ВСТАНОВЛЕННЯ КОНФОРМАЦІЇ ПОЛІПЕПТИДНОГО ЛАНЦЮГА

	β, β_p	α -Helix	3_{10} -Helix	Turn I	Turn II	Turn I'	Turn II'	Half-Turn
$d_{\alpha N}(i, i+4)$								
$d_{\alpha\beta}(i, i+3)$								
$d_{\alpha N}(i, i+3)$								
$d_{NN}(i, i+2)$								
$d_{\alpha N}(i, i+2)$								
d_{NN}								
$d_{\alpha N}$ $^3J_{HN\alpha}$ (Hz)								
	9 9 9 9 9 9 1 2 3 4 5 6	4 4 4 4 4 4 4 1 2 3 4 5 6 7	4 4 4 4 4 4 1 2 3 4 5 6	4 9 1 2 3 4	4 5 1 2 3 4	7 5 1 2 3 4	7 9 1 2 3 4	4 9 1 2 3 4