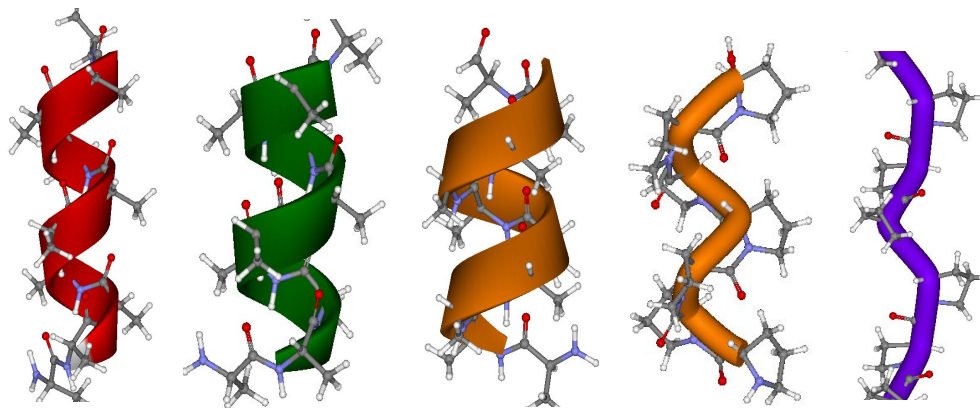


ЕЛЕМЕНТИ ВТОРИННОЇ СТРУКТУРИ ПЕПТИДІВ І БІЛКІВ



а)

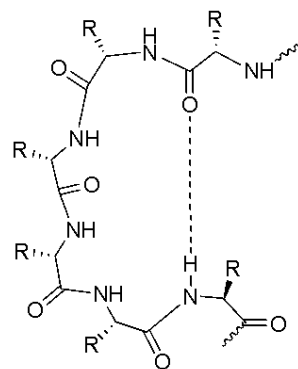
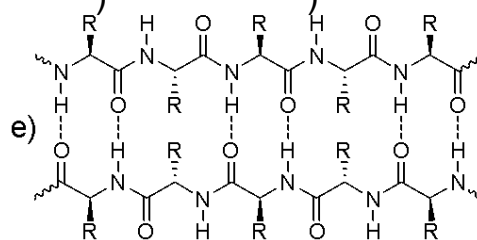
б)

в)

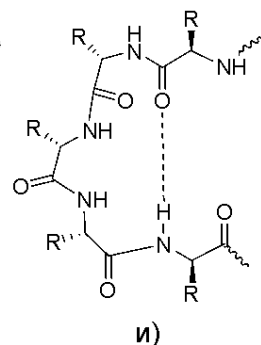
г)

д)

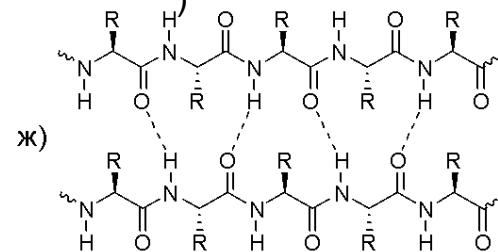
а) 3_{10} -спіраль (права);
 б) α -спіраль (права);
 в) π -спіраль (права);
 г) спіраль PP I (права);
 д) спіраль PP II (ліва);
 е) антипаралельна β -складчата структура;
 ж) паралельна β -складчата структура;
 з) π -вигін; и) α -вигін;
 к) β -вигин I типу;
 л) β -вигин II типу;
 м) γ -вигин.



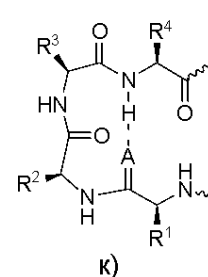
з)



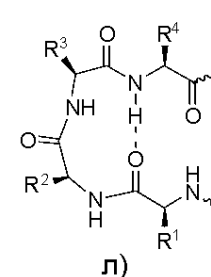
и)



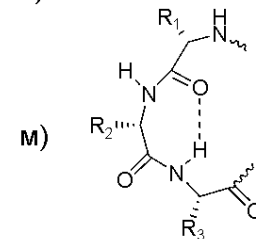
ж)



к)

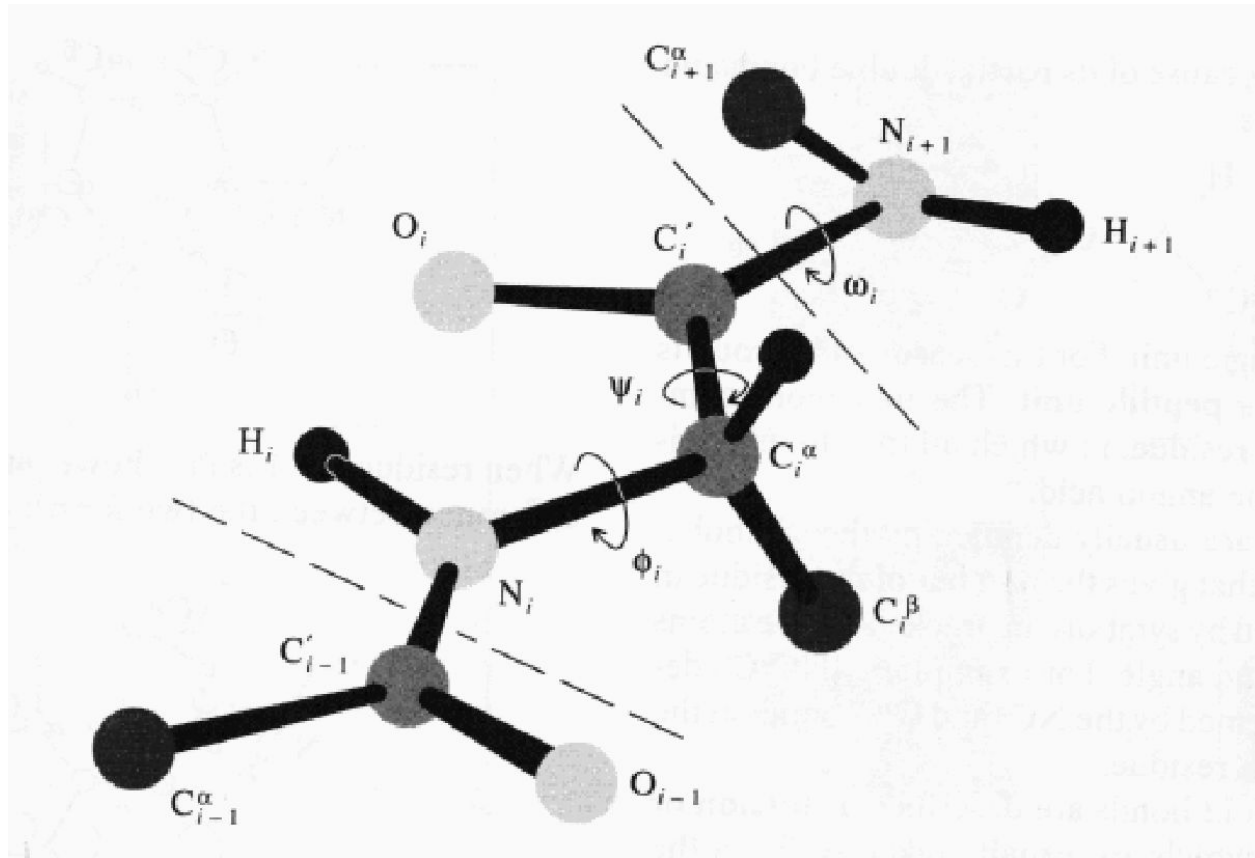


л)



м)

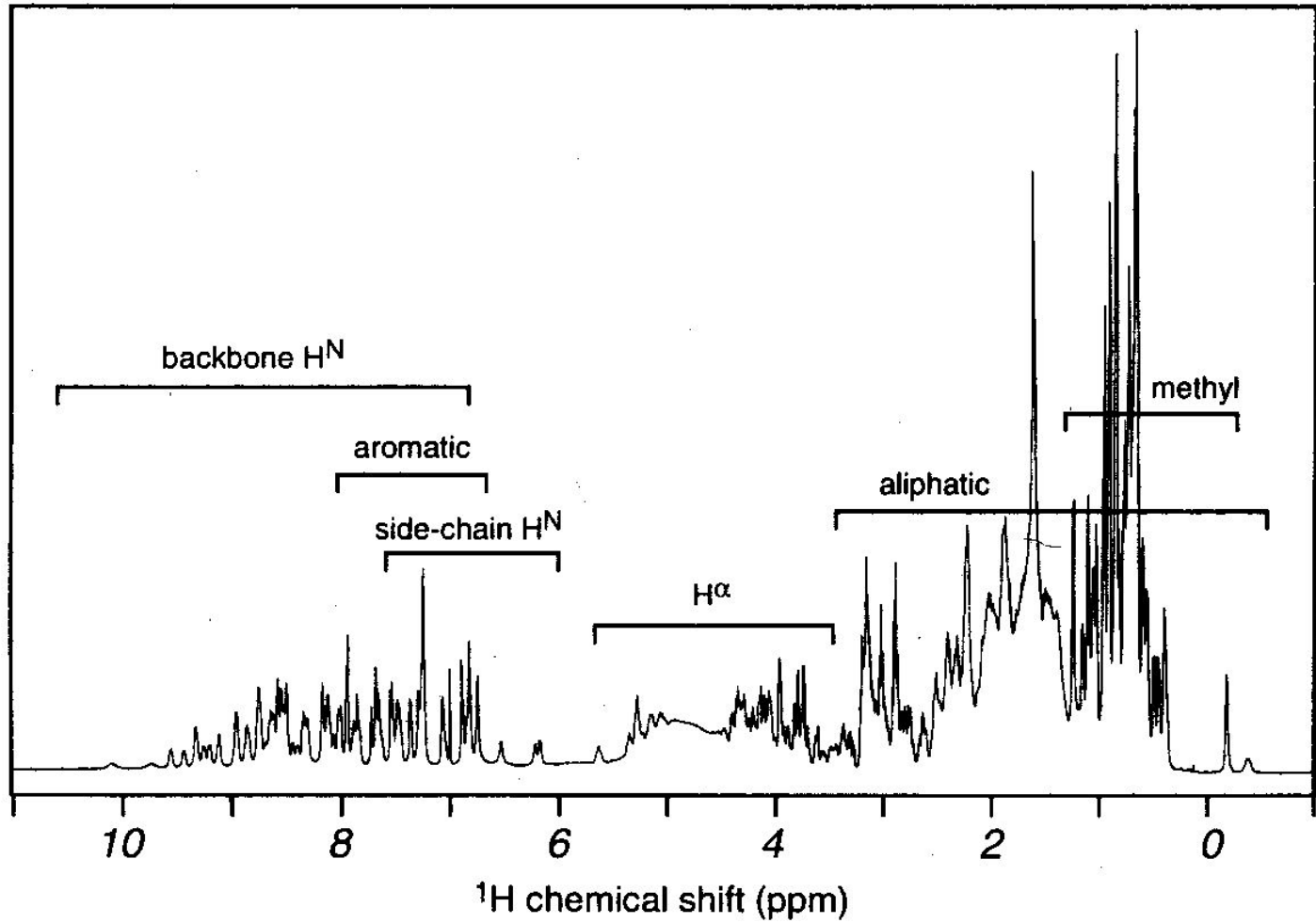
КУТИ, ЯКІ ОПИСУЮТЬ КОНФОРМАЦІЮ ПОЛІПЕПТИДНОГО ЛАНЦЮГА



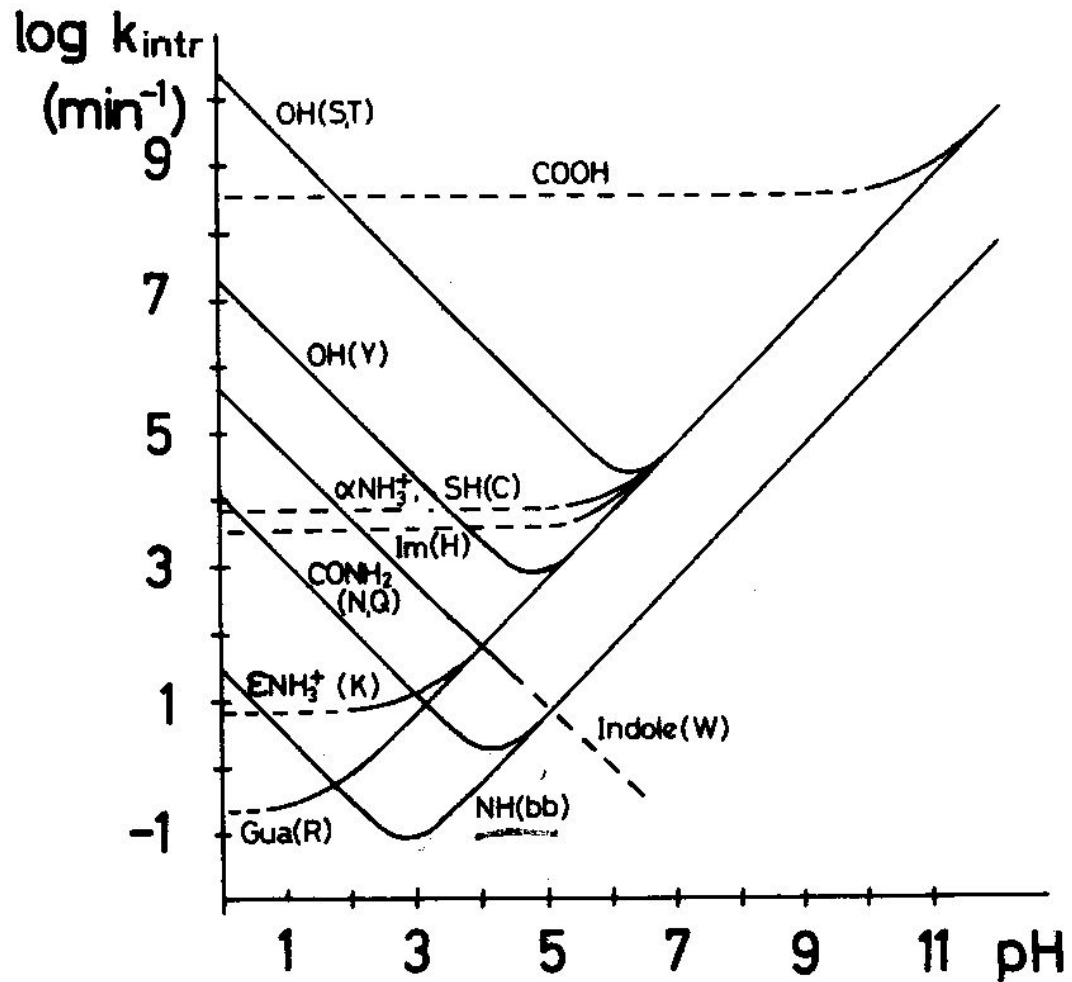
ТИПОВІ ЗНАЧЕННЯ КУТІВ, ЩО ОПИСУЮТЬ КОНФОРМАЦІЮ ПОЛІПЕПТИДНОГО ЛАНЦЮГА ДЛЯ РІЗНИХ ЕЛЕМЕНТІВ ВТОРИННОЇ СТРУКТУРИ

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

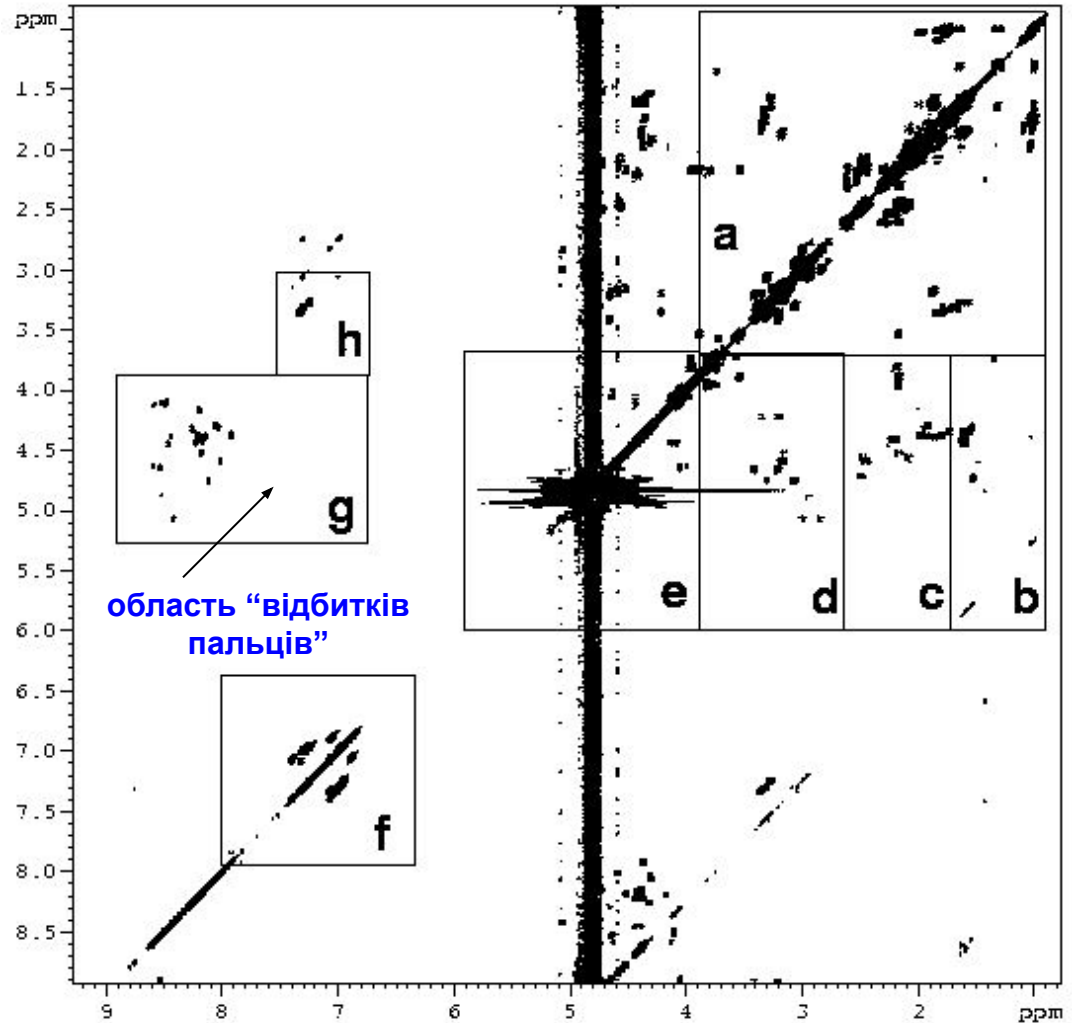


ЗАЛЕЖНІСТЬ ШВИДКОСТІ ОБМІНУ NH ПРОТОНІВ ВІД pH

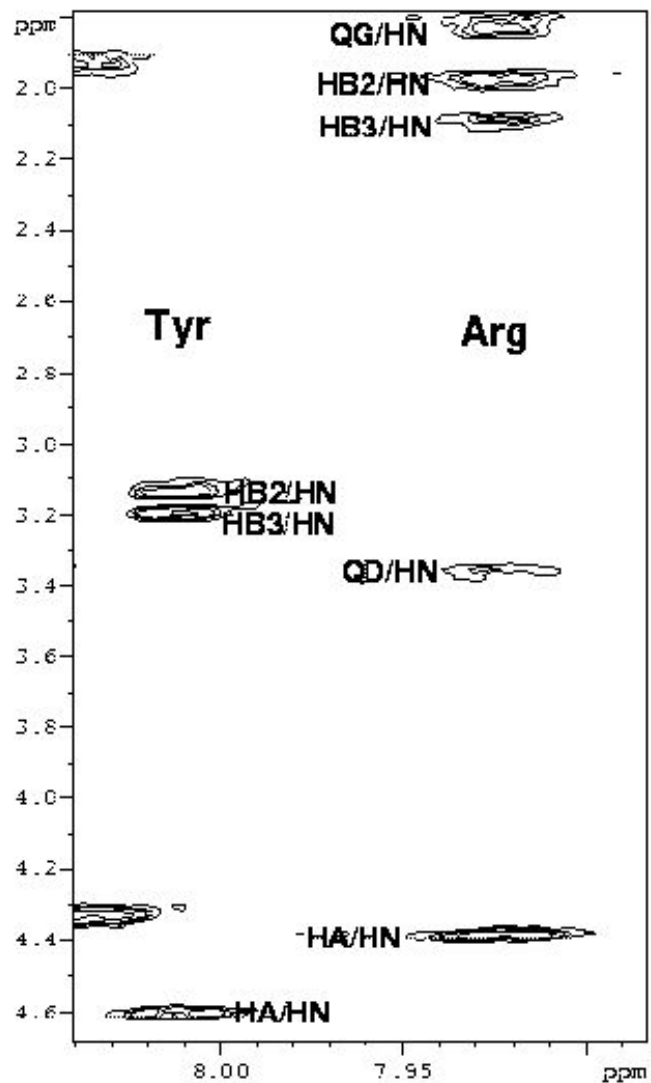


НАЙВАЖЛИВІШІ КОРЕЛЯЦІЇ В COSY СПЕКТРАХ ПЕПТИДІВ

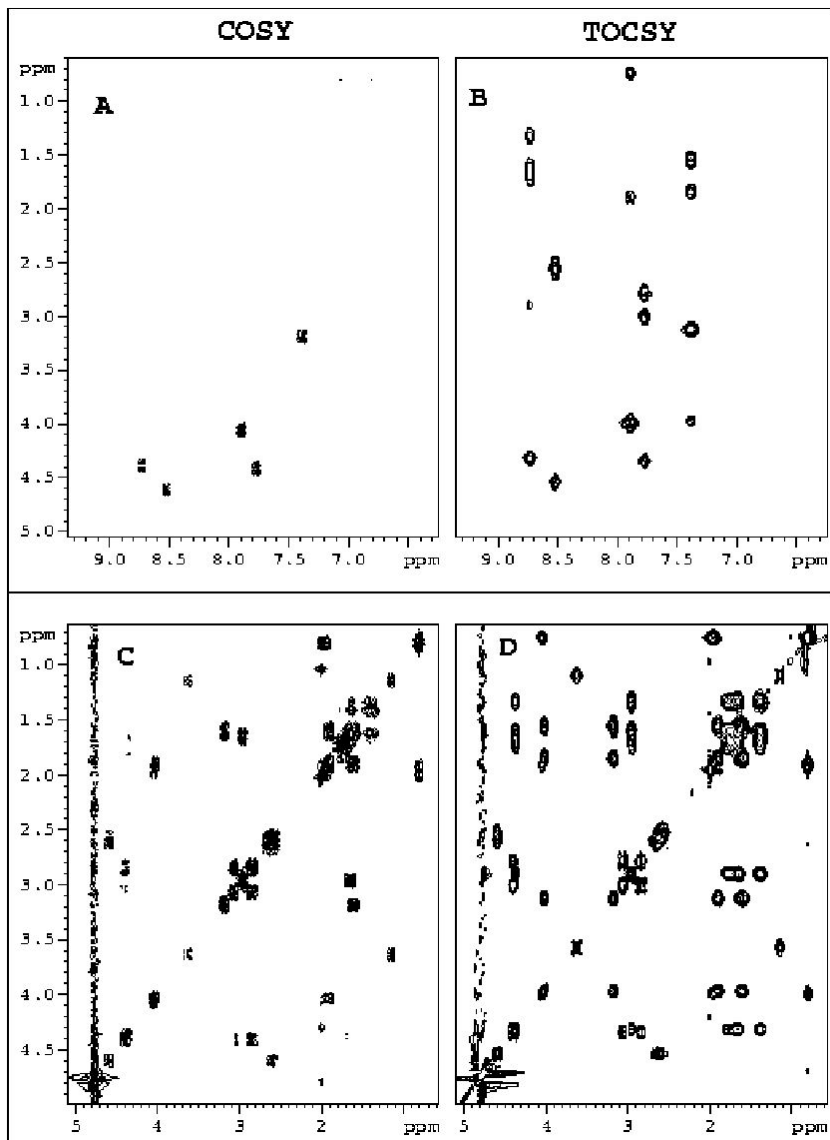
- a) всі нелабільні неароматичні протони бокових ланцюгів (крім $\beta\text{H}-\gamma\text{CH}_3$ Thr, $\delta\text{H}-\delta\text{H}$ Pro, $\beta\text{H}-\beta\text{H}$ Ser;
- b) $\alpha\text{H}-\beta\text{CH}_3$ Ala, $\beta\text{H}-\gamma\text{CH}_3$ Thr;
- c) $\alpha\text{H}-\beta\text{H}$ Val, Leu, 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) NH- αH ;
- h) $\delta\text{CH}_2-\varepsilon\text{NH}$ Arg.



ТОССУ КОРЕЛЯЦІЇ – ВИЯВЛЕННЯ ОКРЕМИХ СПІНОВИХ СИСТЕМ

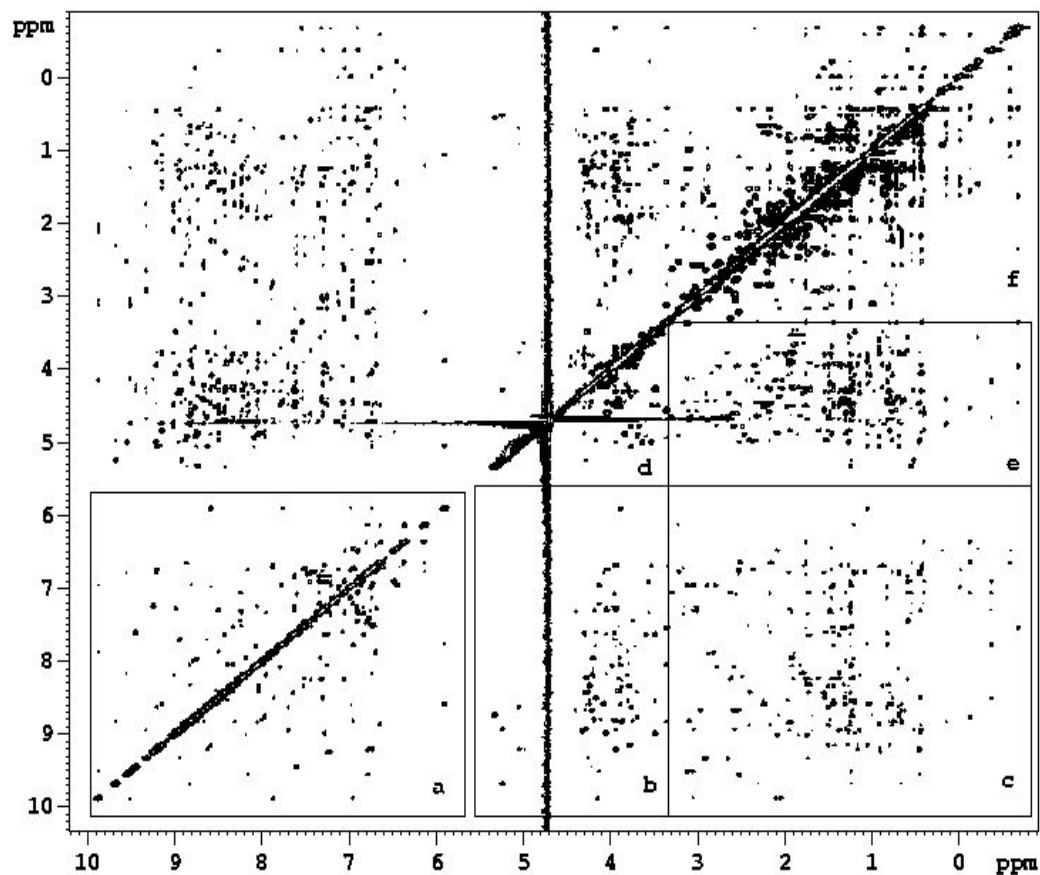


ПОРІВНЯННЯ TOCSY ТА COSY на прикладі кореляції амідних та аліфатичних протонів



НАЙВАЖЛИВІШІ КОРЕЛЯЦІЇ В NOESY СПЕКТРАХ ПЕПТИДІВ

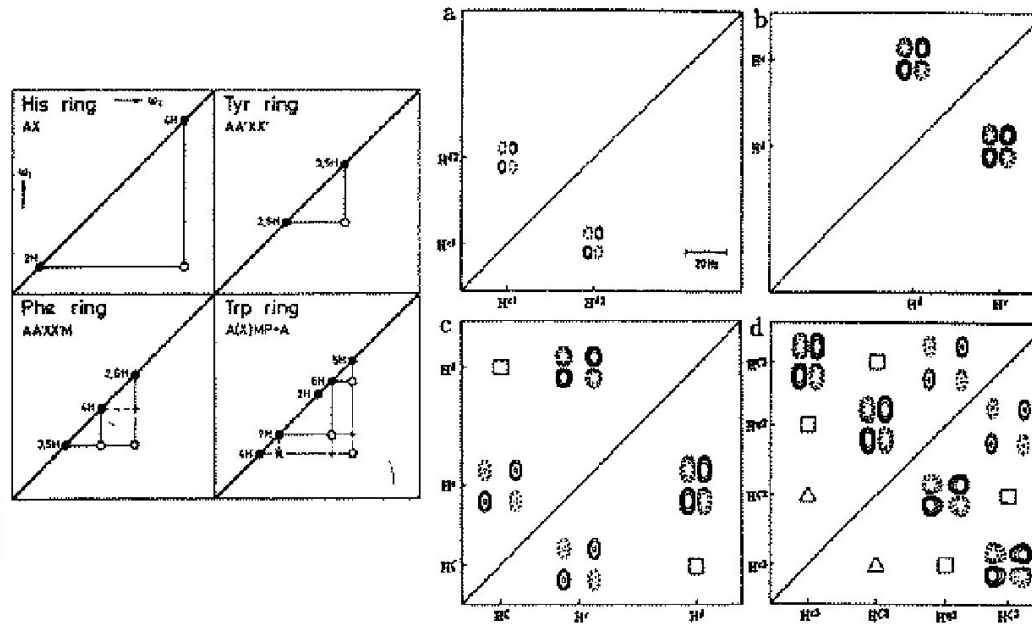
- a) NH, NH-ароматичні, аром.-аром.;
- b) NH, аром.- α H, δ H Ser, β H Ser, Thr;
- c) NH, аром.-аліф.;
- d) α H, δ H Pro, β H Ser, Thr- α H, δ H Pro;
- e) α H, δ H Pro; β H Ser, Thr-аліф.;
- f) аліф.-аліф.



СТРАТЕГІЇ ВІДНЕСЕННЯ ПІКІВ В СПЕКТРАХ ПЕПТИДІВ

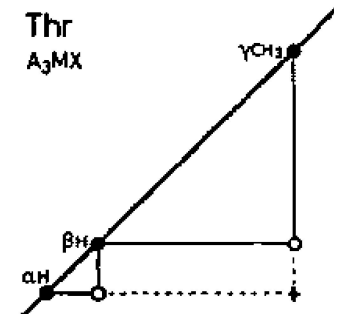
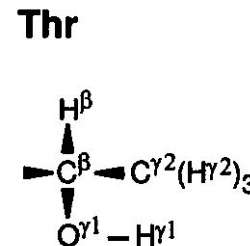
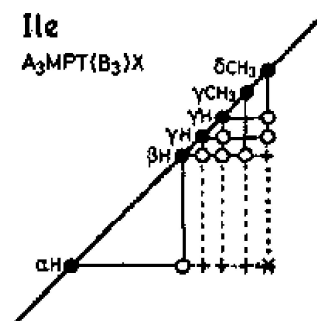
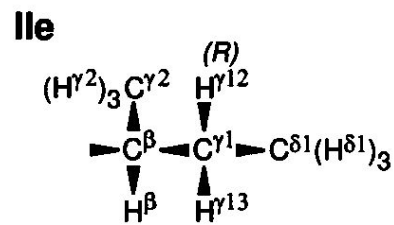
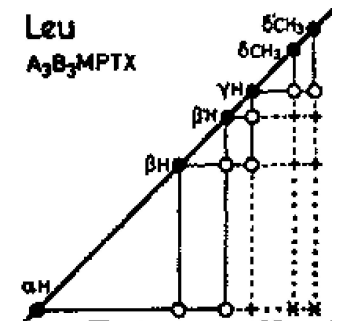
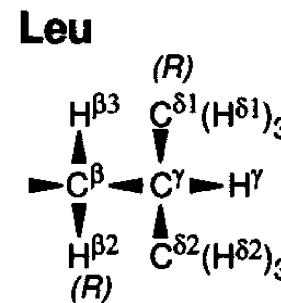
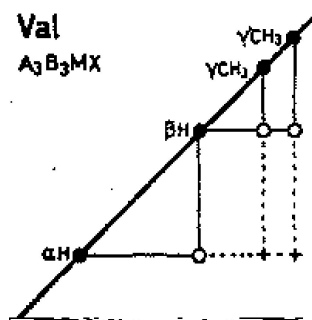
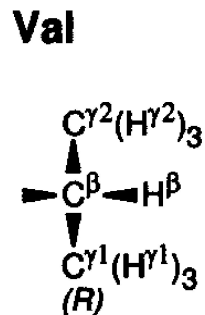
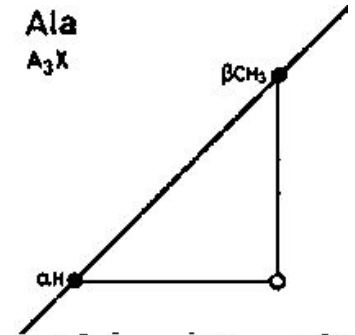
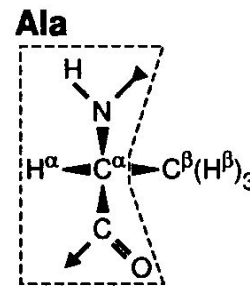
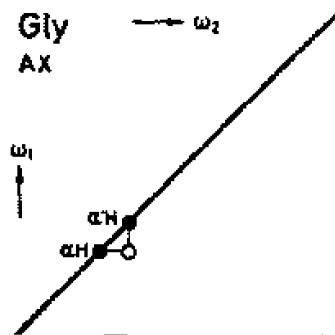
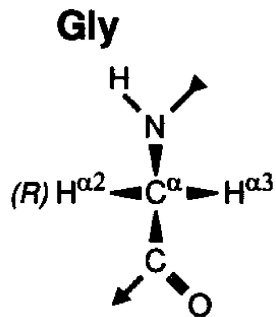
- оптимізація умов ЯМР-експериментів
- ідентифікація спінових систем (TOCSY, COSY):
враховується кількість протонів в спінових системах та характеристичні хімічні зсуви

спінові системи ароматичних замісників



СТРАТЕГІЇ ВІДНЕСЕННЯ ПІКІВ В СПЕКТРАХ ПЕПТИДІВ

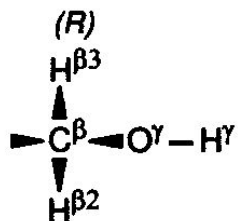
спінові системи бічних ланцюгів



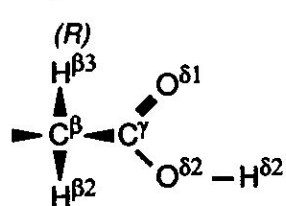
СТРАТЕГІЇ ВІДНЕСЕННЯ ПІКІВ В СПЕКТРАХ ПЕПТИДІВ

спінові системи бічних ланцюгів

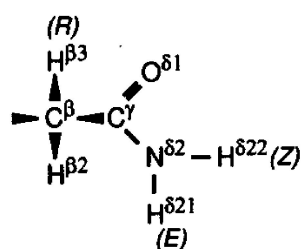
Ser



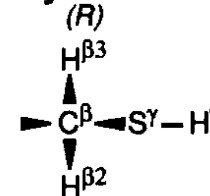
Asp



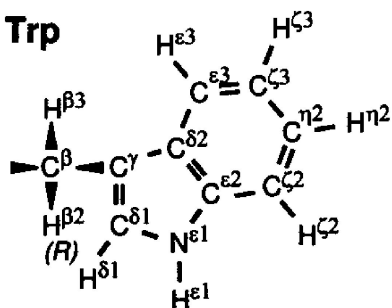
Asn



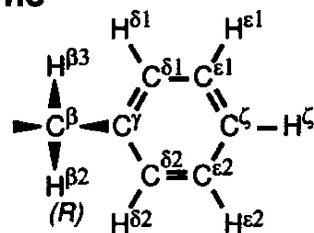
Cys



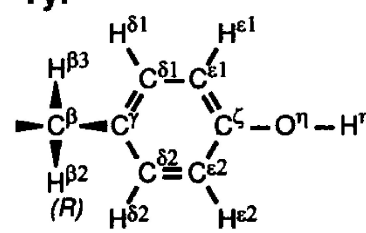
Trp



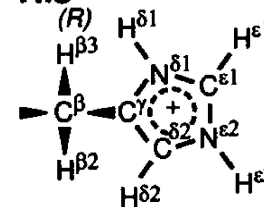
Phe



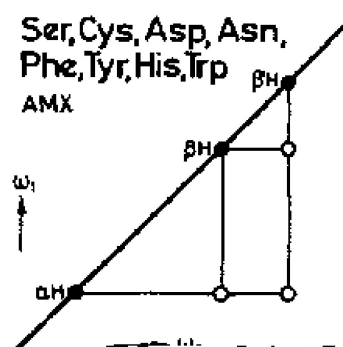
Tyr



His



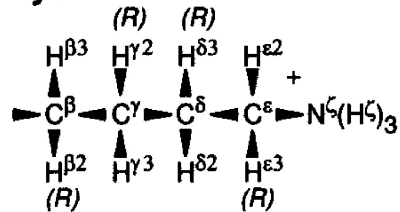
Ser, Cys, Asp, Asn,
Phe, Tyr, His, Trp
AMX



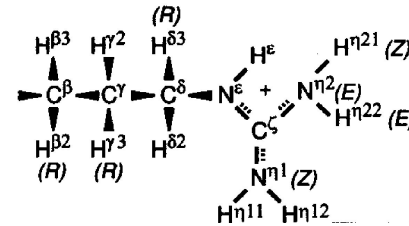
СТРАТЕГІЇ ВІДНЕСЕННЯ ПІКІВ В СПЕКТРАХ ПЕПТИДІВ

спінові системи бічних ланцюгів

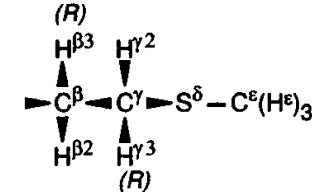
Lys



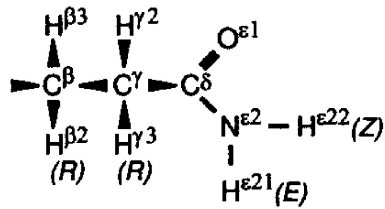
Arg



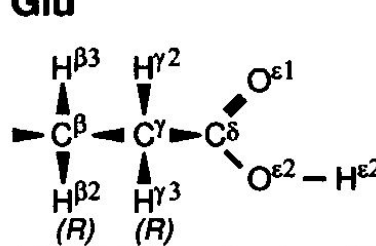
Met



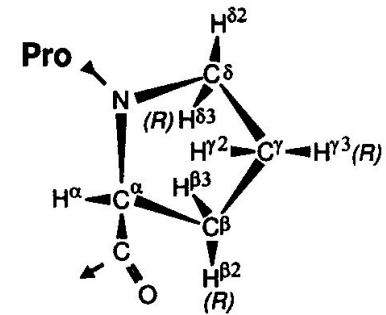
Gln



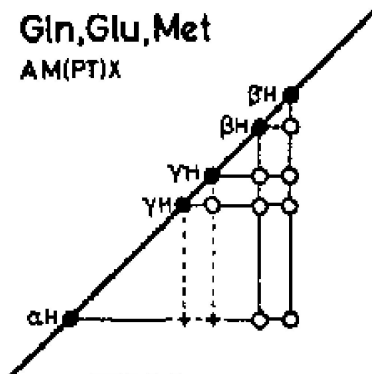
Glu



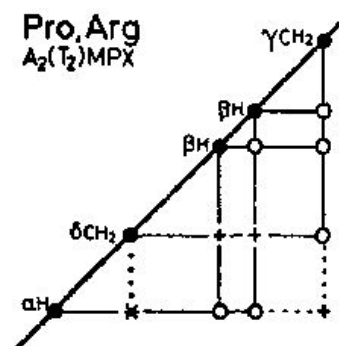
Pro



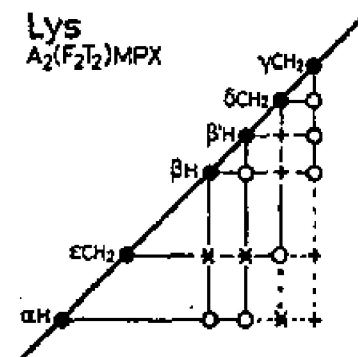
Gln, Glu, Met
AM(P1)X



Pro, Arg
A2(T2)MPX



Lys
A2(F2T2)MPX



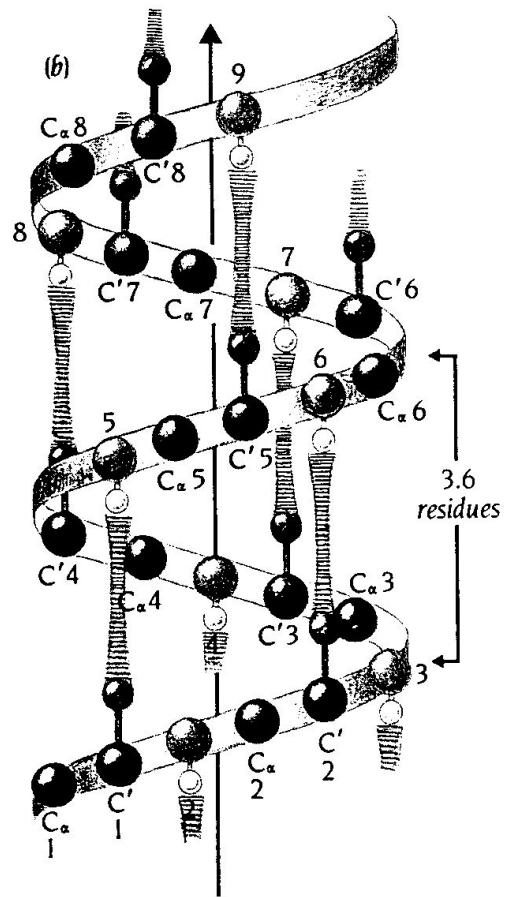
СТРАТЕГІЇ ВІДНЕСЕННЯ ПІКІВ В СПЕКТРАХ ПЕПТИДІВ

типові хімічні зсуви для random coil
пептидів

залишок	NH	Ha	H β	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	γ CH 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	γ CH ₂ 1.45, 1.16; γ CH ₃ 0.91; δ CH ₃ 0.86
Lys	8.29	4.32	1.84, 1.75	γ CH ₂ 1.44, 1.44; δ CH ₂ 1.68, 1.68; ϵ CH ₂ 2.99, 2.99; ϵ NH ₃ ⁺ 7.81
Leu	8.16	4.34	1.62, 1.62	γ CH 1.59; δ CH ₃ 0.92, 0.87
Met	8.28	4.48	2.11, 2.01	γ CH ₂ 2.60, 2.54; ϵ CH ₃ 2.10
Asn	8.40	4.74	2.83, 2.75	γ NH ₂ 7.59, 6.91
Pro	-	4.42	2.29, 1.94	γ CH ₂ 2.02, 2.02; δ CH ₂ 3.63, 3.63
Gln	8.32	4.34	2.12, 1.99	γ CH ₂ 2.36, 2.36; δ NH ₂ 7.52, 6.85
Arg	8.23	4.34	1.86, 1.76	γ CH ₂ 1.63, 1.63; δ CH ₂ 3.20, 3.20; ϵ NH 8.07
Ser	8.31	4.47	3.89, 3.87	
Thr	8.15	4.35	4.24	γ CH ₃ 1.21
Val	8.03	4.12	2.08	γ CH 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

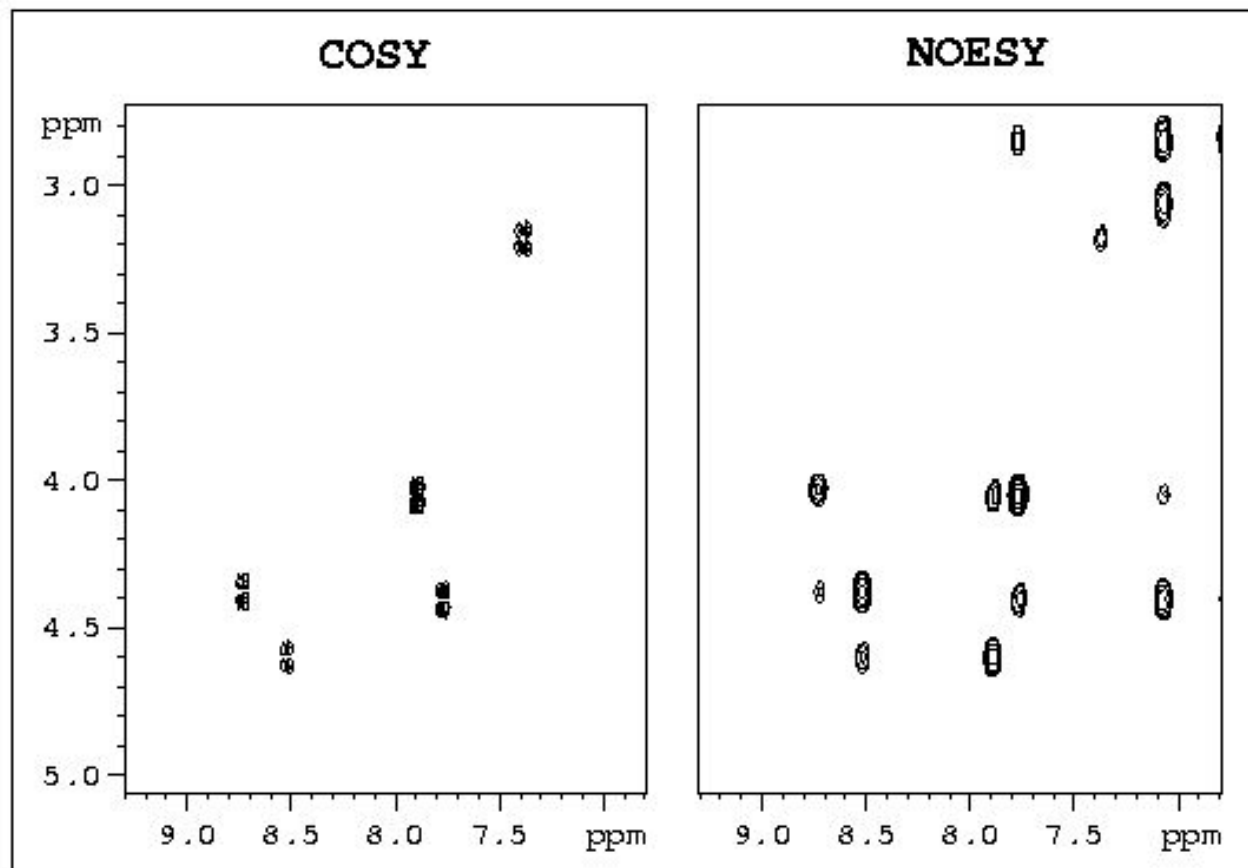
ВСТАНОВЛЕННЯ АМІНОКИСЛОТНОЇ ПОСЛІДОВНОСТІ

-аналіз NOESY спектрів



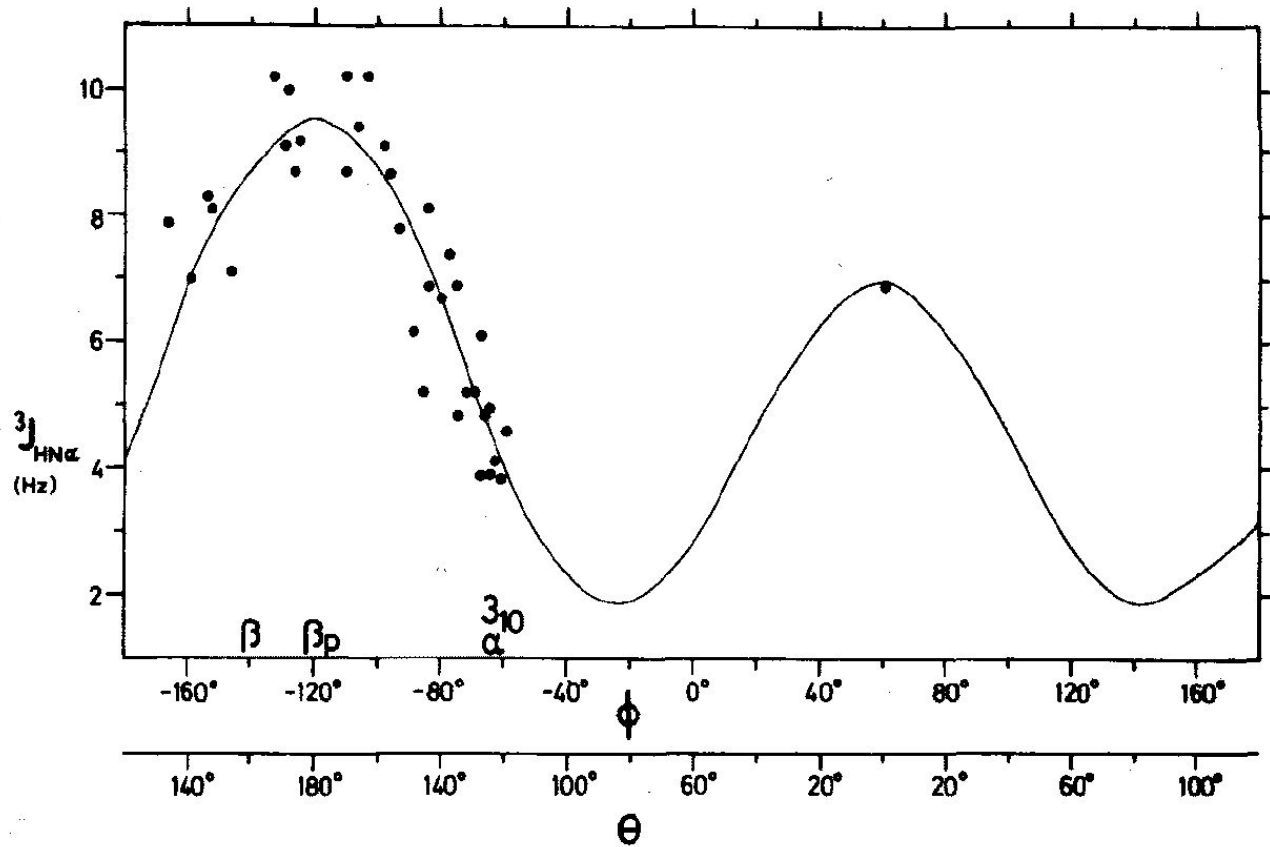
ВСТАНОВЛЕННЯ АМІНОКИСЛОТНОЇ ПОСЛІДОВНОСТІ

-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