

# Určování torzních úhlů - Peptidy

C9531 - Seminář k přednášce Strukturní biochemie

**Viktor Bartošík, [484477@mail.muni.cz](mailto:484477@mail.muni.cz)**

Přírodovědecká fakulta Masarykovy univerzity

27. září 2023

# Peptidy

skládají se z  $\alpha$ -L-aminokyselin, které jsou spojeny peptidovou vazbou v řetězce - polypeptidy

vzájemná kombinovatelnost a "stavebnicové" uspořádání umožňují nespočet funkcí

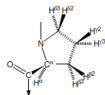
konformaci určují **torzní úhly**



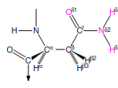
**Obrázek:** Streptavidin v komplexu s biotinem, 14.18 kDa, PDBcode:2rtg



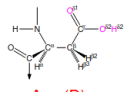
Gly (G)



Pro (P)



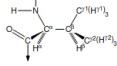
Asn (N)



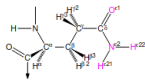
Asp (D)



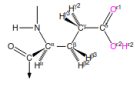
Ala (A)



Val (V)



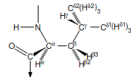
Gln (Q)



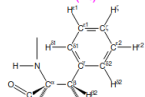
Glu (E)



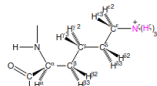
Ser (S)



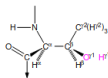
Leu (L)



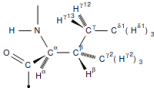
Phe (F)



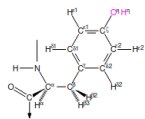
Lys (K)



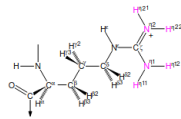
Thr (T)



Ile (I)



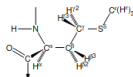
Tyr (Y)



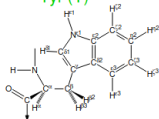
Arg (R)



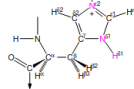
Cys (C)



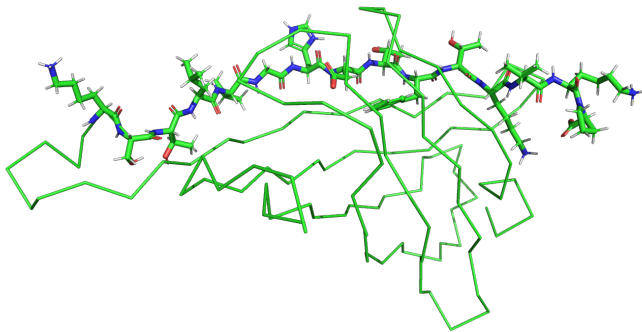
Met (M)



Trp (W)



His (H)



**Obrázek:** Monomer streptavidinu, PDBcode:2rtg - vizualizace C-terminálního  $\beta$ -listu se zvýrazněnými aminokyselinami.

V pořadí od N-konce: Lys, Ser, Thr, Leu, Val, Gly, His, Asp, Thr, Phe, Thr, Lys, Val, Lys, Pro

# Torzni úhly

## páteř × postranní řetězec

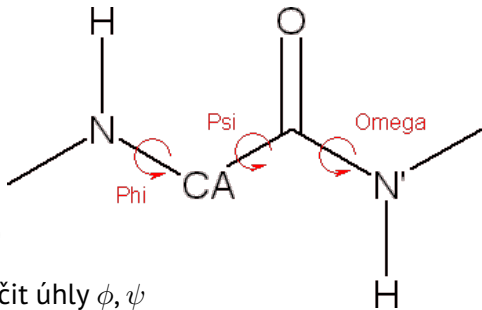
v páteři 3 torzní úhly:  $\phi$ ,  $\psi$ ,  $\omega$

peptidová vazba má částečně dvojný charakter

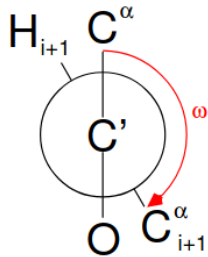
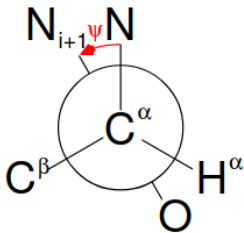
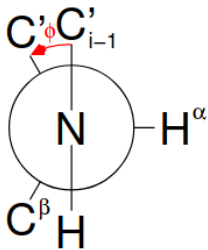
úhel  $\omega$  (peptidové vazby)  
nabývá hodnot  $180^\circ$  a vzácně  $0$

pro určení konformace stačí určit úhly  $\phi$ ,  $\psi$

zobrazení pomocí Newmanovy projekce

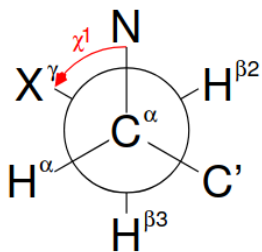


# Torzni úhly $\phi$ , $\psi$ , a $\omega$ v páteři

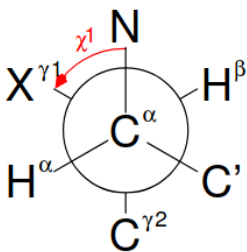


# Torzni úhel $\chi^1$ v postranním řetězci

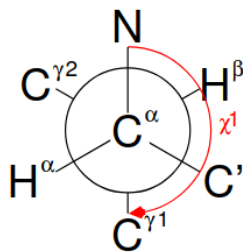
většina aminokyselin



threonin, isoleucin



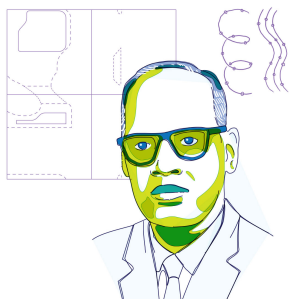
valin



# Ramachandranův diagram

G. N. Ramachandran byl indický fyzik, zabývající RTG-krytalografií a optickými vlastnostmi krystalů

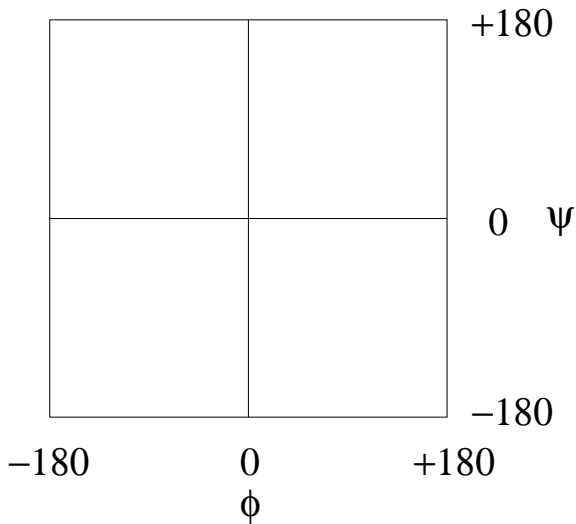
Jako první popsal tri-helikální strukturu kolagenu (1955) a zasloužil se o používání Ramachandranova diagramu pro zobrazování torzních úhlů v proteinech (1962/1963)

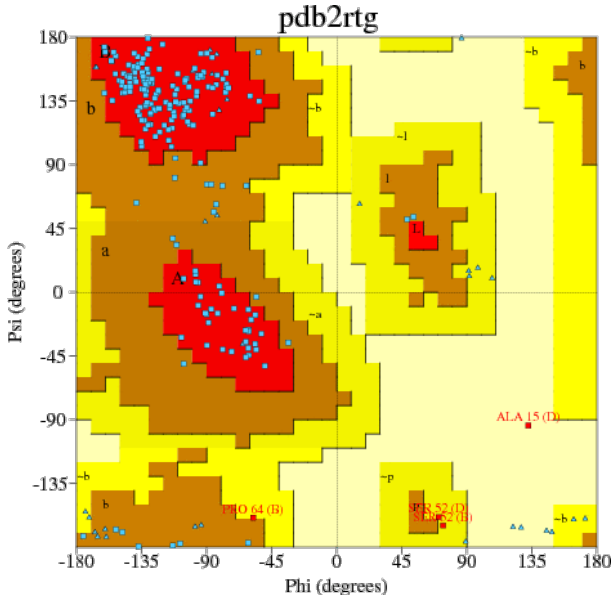


**Obrázek:** Gopalamudram Narayanan Ramachandran



# Ramachandranův diagram





**Obrázek:** Ramachandranův diagram zobrazující torzní úhly reziduí monomeru streptavidinu, PDB ID: 2rtg. Červené oblasti jsou typické pro  $\beta$ -list (vlevo nahoře),  $\alpha$ -helix (vlevo uprostřed) a levotočivou  $\beta$ -smyčku (vpravo)

# Modely k procvičování

<https://web.ncbr.muni.cz/~lzidek/C9531/practice/>

**MASARYKOVA  
UNIVERZITA**