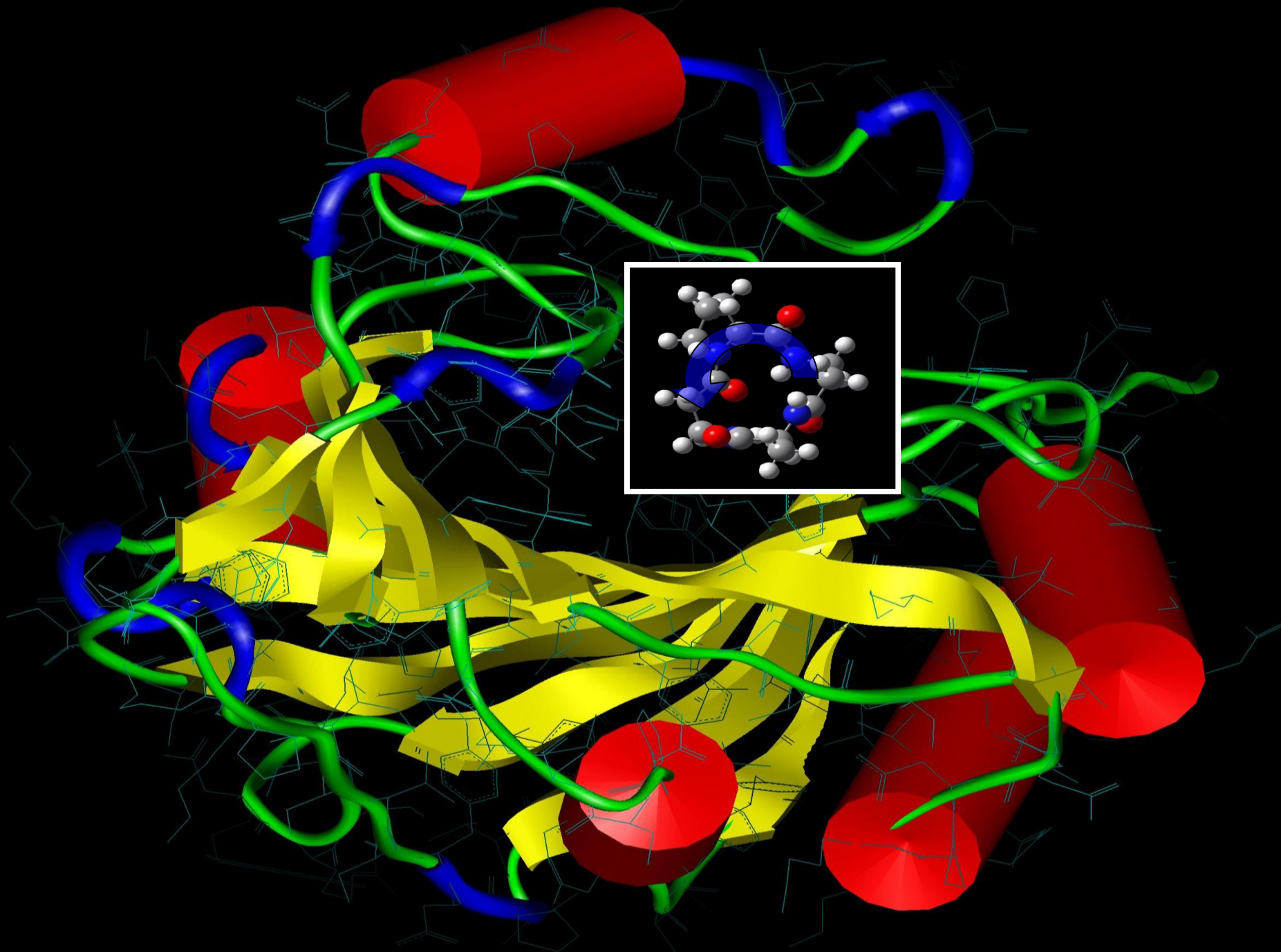


Modern szerkezetkutató módszerek fehérjék
inverz γ -kanyar szerkezeteinek azonosítására

avagy

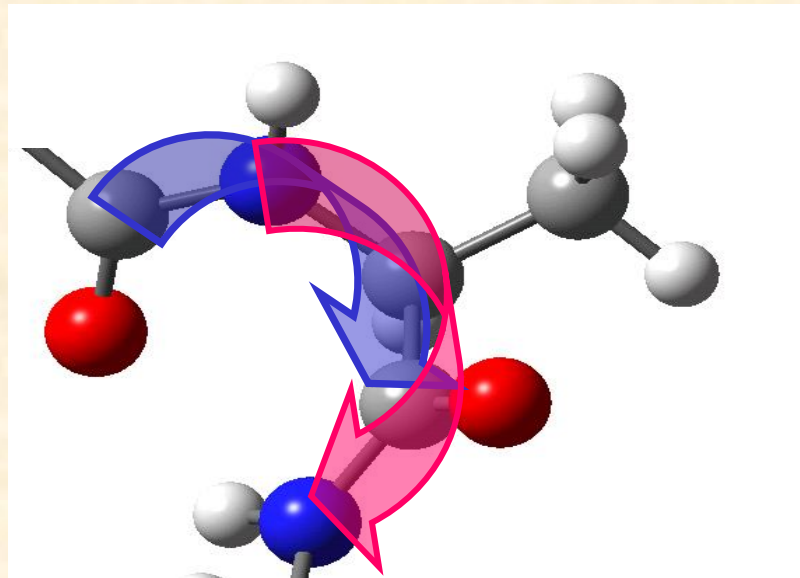
Amit a *ciklo*[Ala- β -Ala-Pro- β -Ala]
társzerkezetéről megtudhatunk



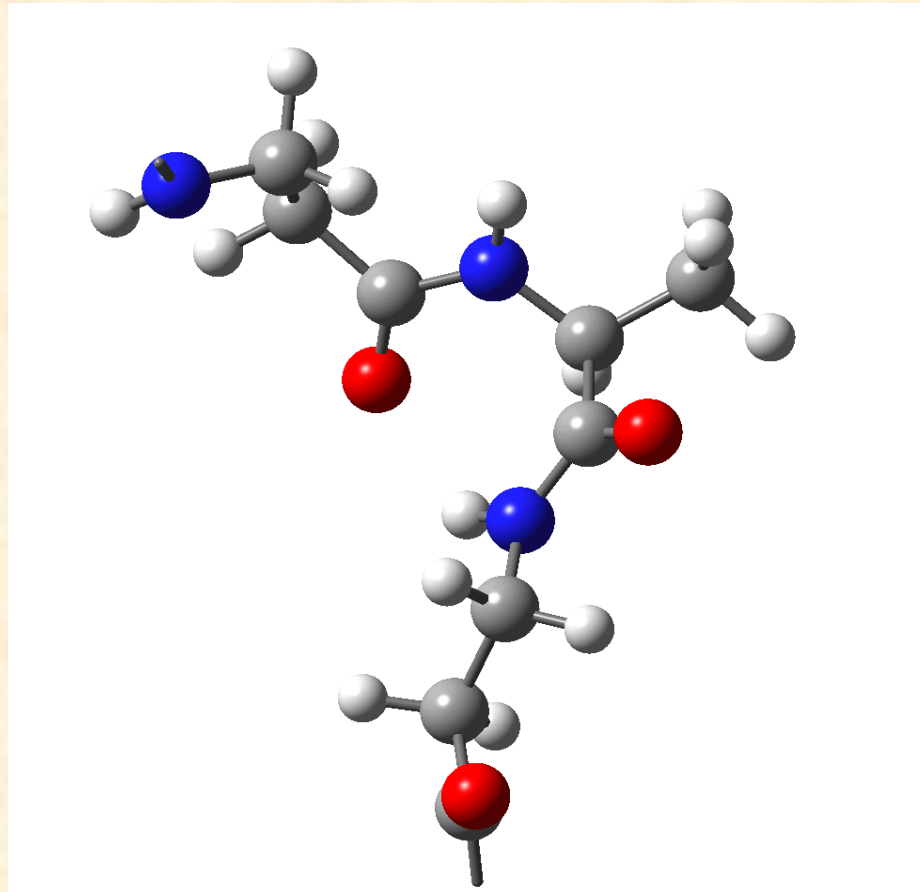
Inverz γ -kanyar

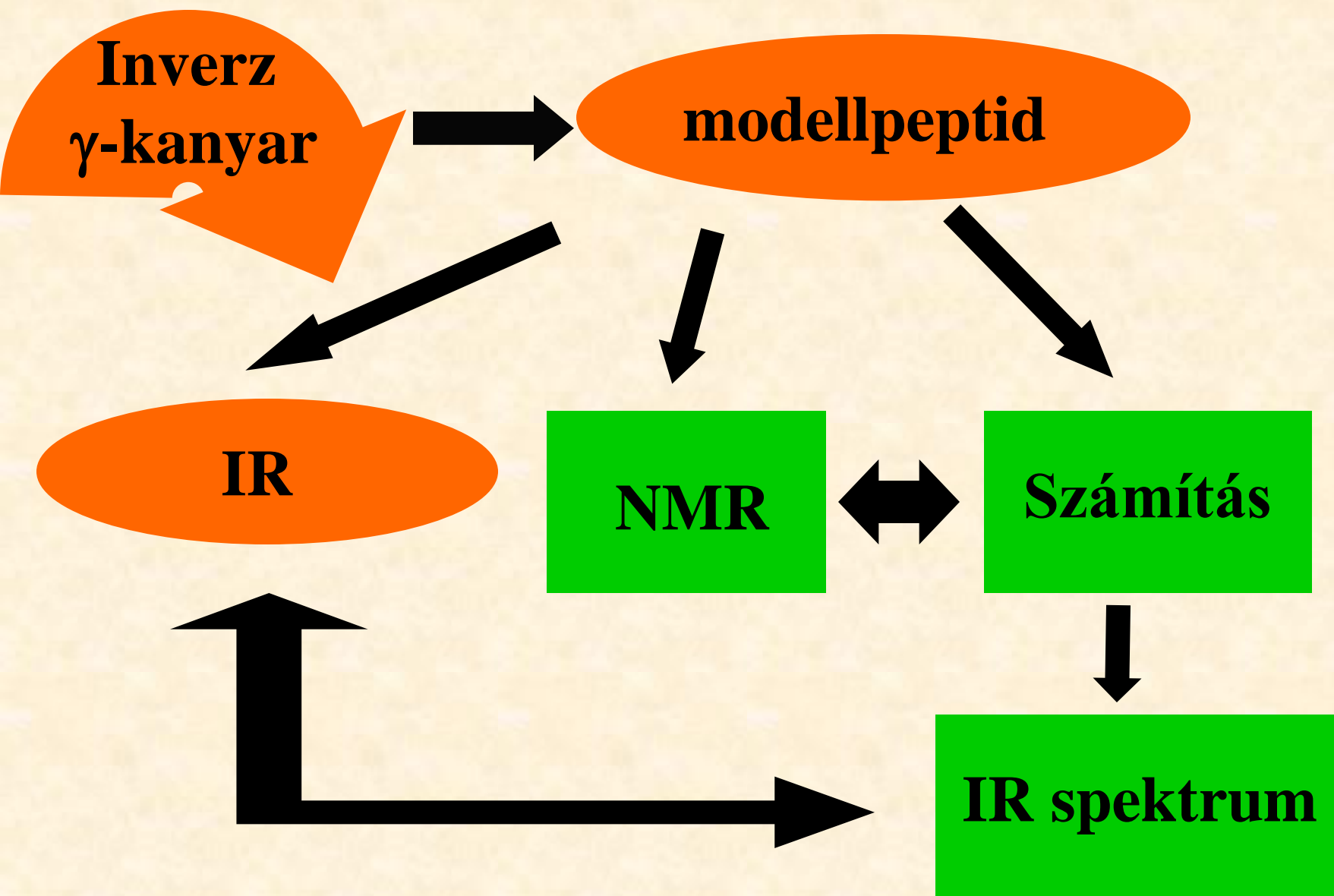
- Fehérje másodlagos szerkezeti építőeleme
- Három aminosav alkotja
- Jellemzése torziós szögek segítségével (ϕ , ψ)

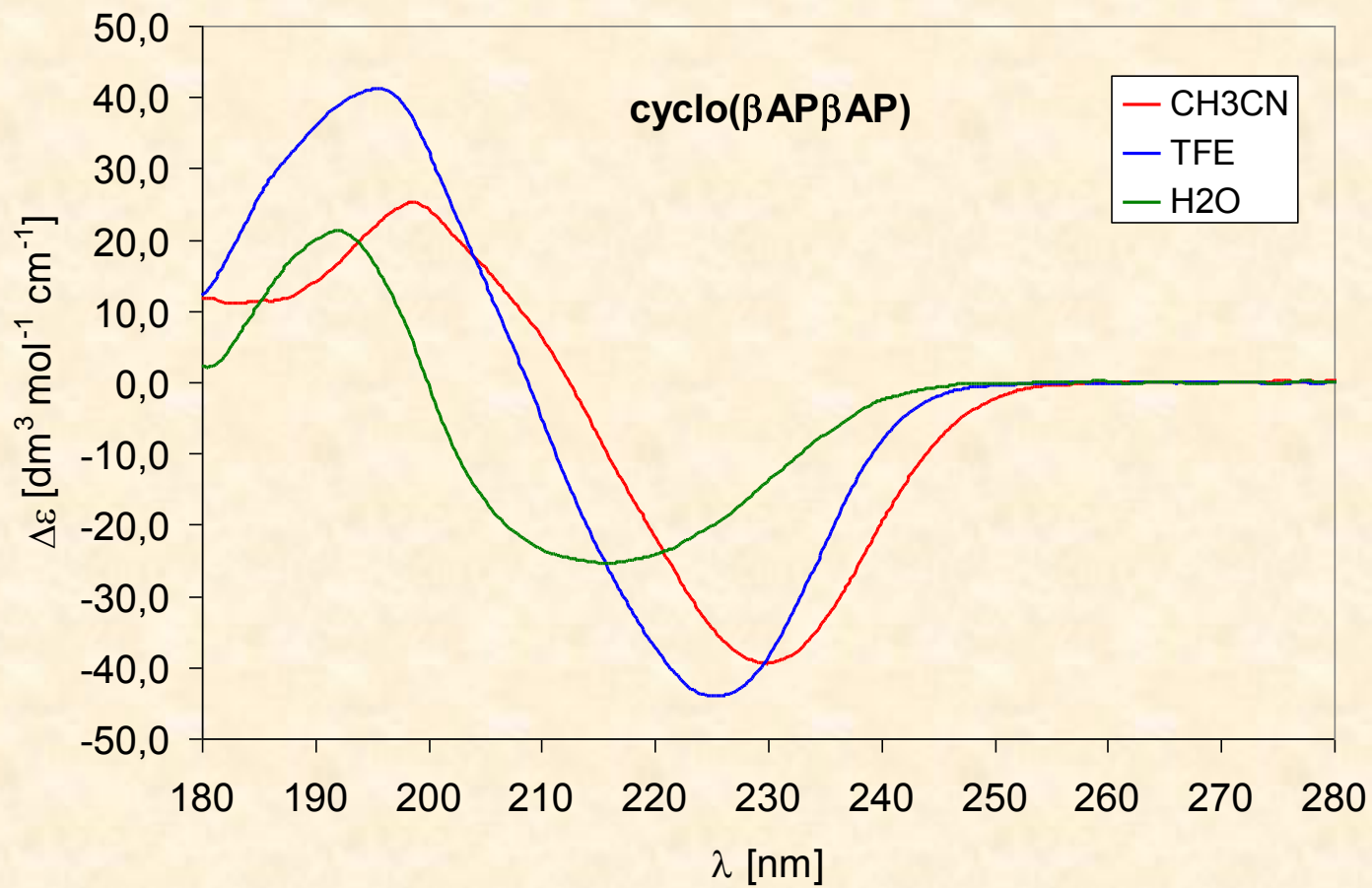
$$\phi \approx -80^\circ, \psi \approx 80^\circ$$



A β -Ala-Ala- β -Ala peptidrészlet inverz γ -kanyar térszerkezettel







Szerkezetvizsgálat NMR-spektroszkópiával

spektrumok felvétele



jelek azonosítása (asszignálása)
(TOCSY és NOESY spektrum alapján)



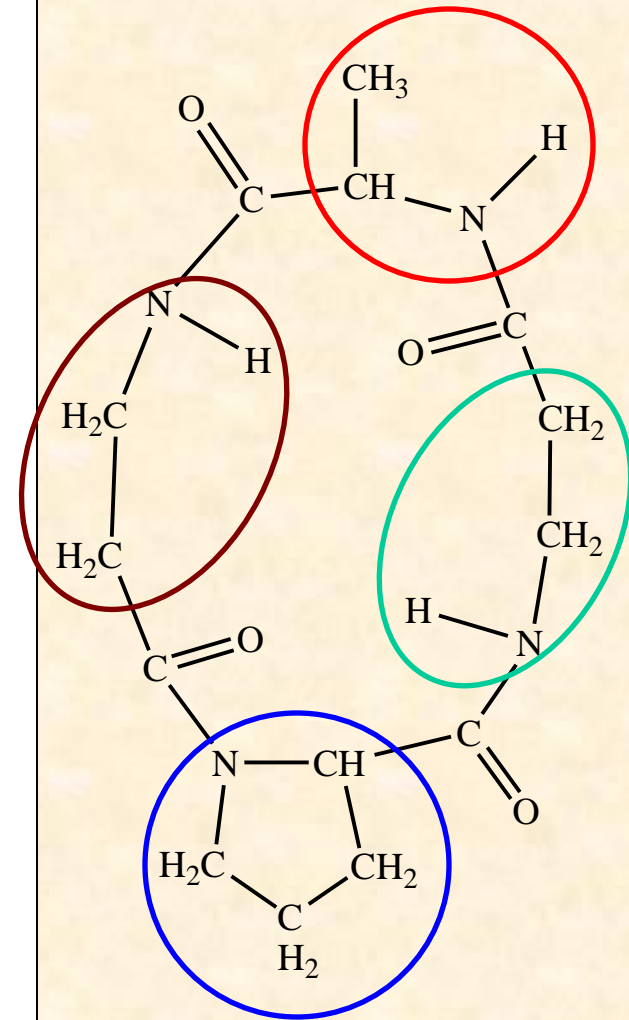
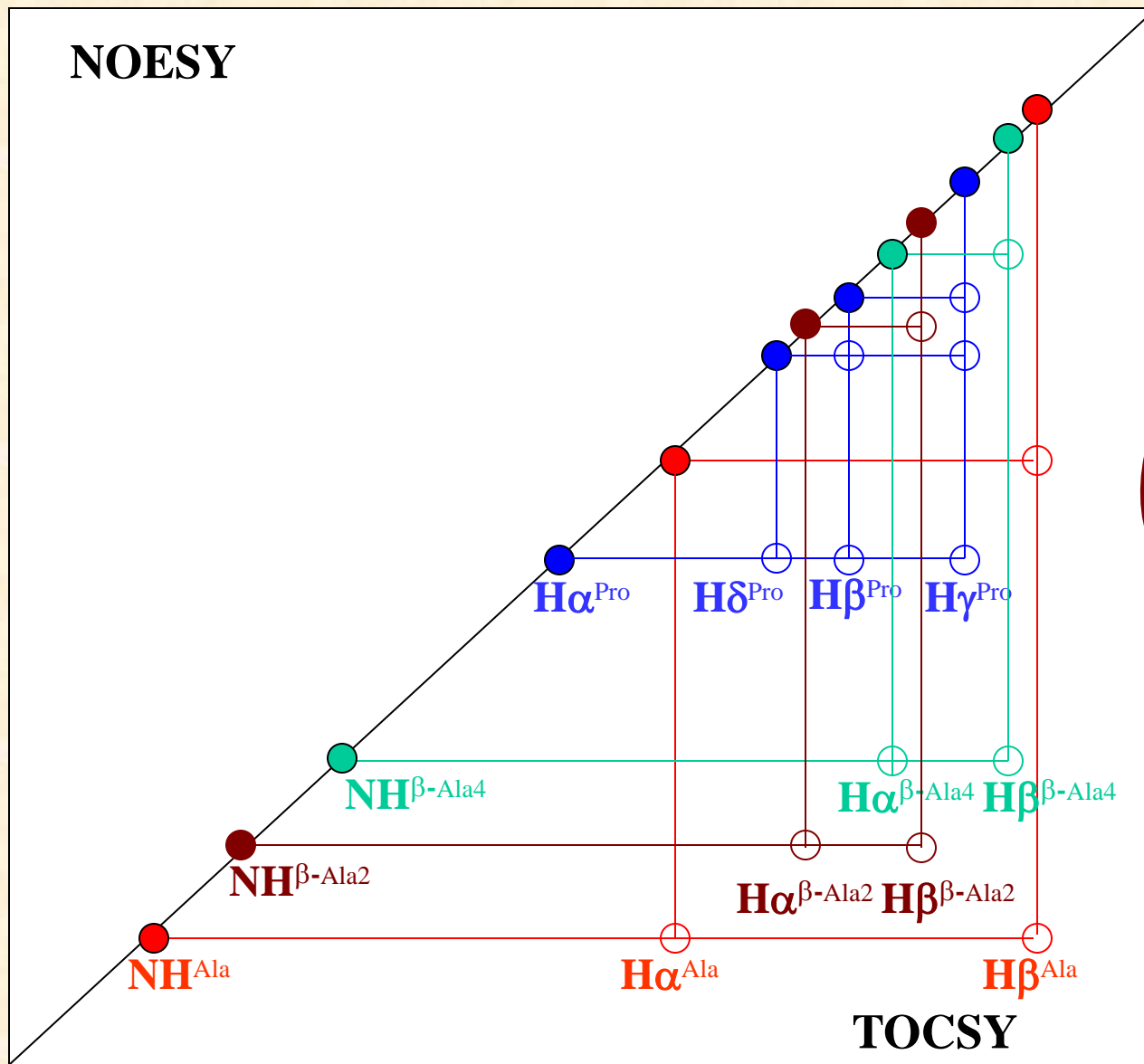
távolság jellegű kényszerfeltételek gyűjtése
(NOESY spektrum alapján)



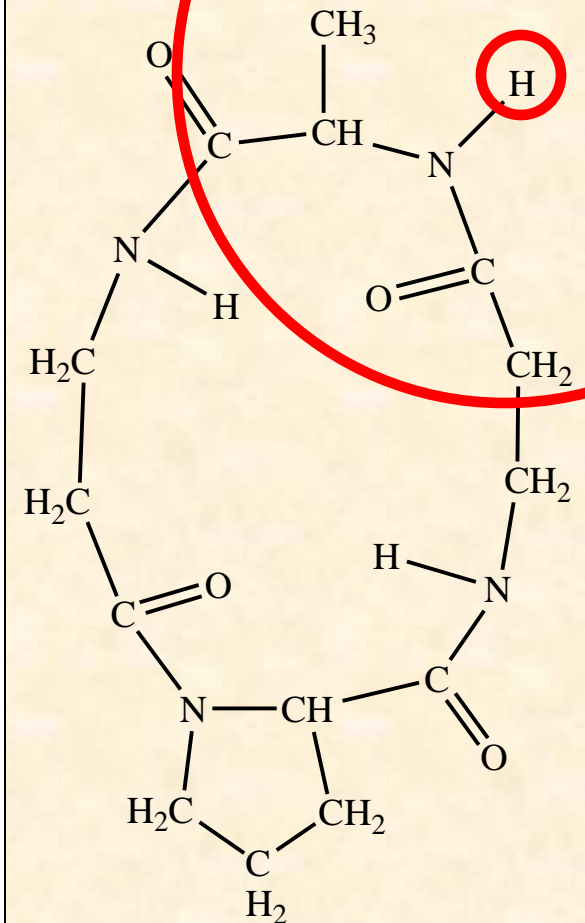
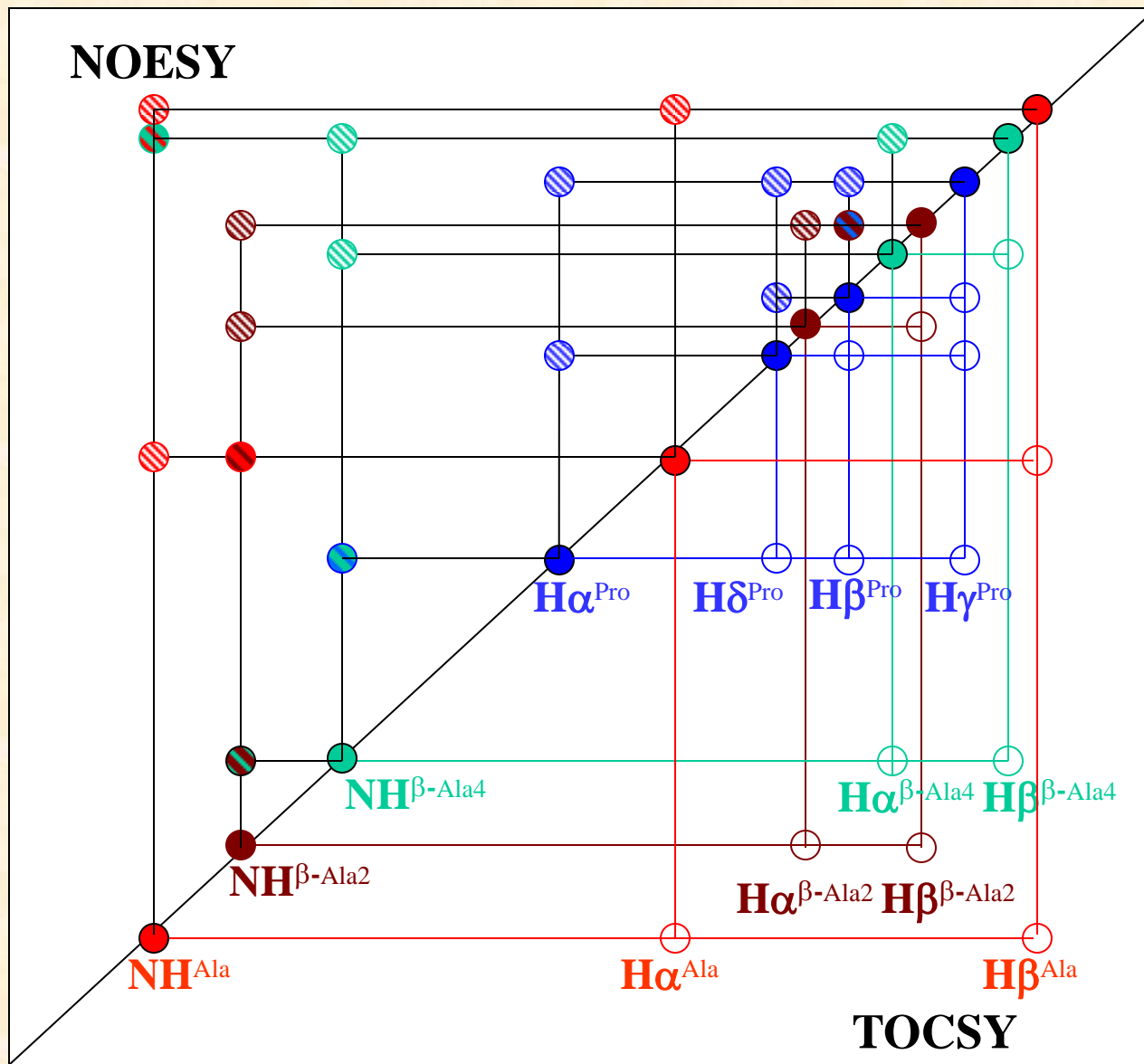
szerkezetszámolás

Az általunk használt 2D NMR spektrumok információtartama

NOESY

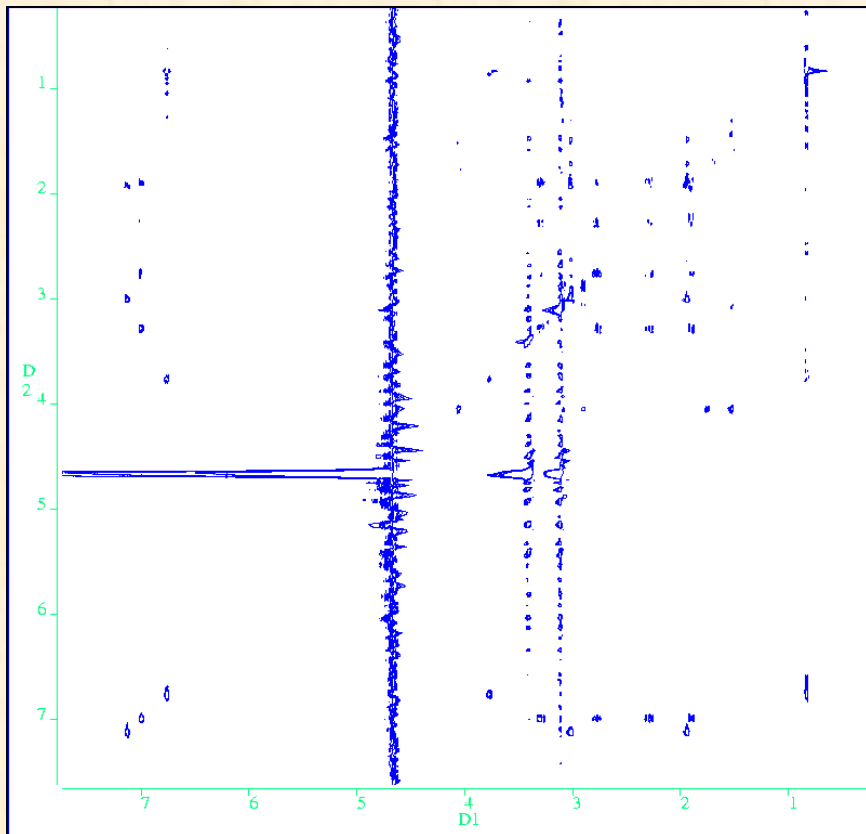


Az általunk használt 2D NMR spektrumok információtartama

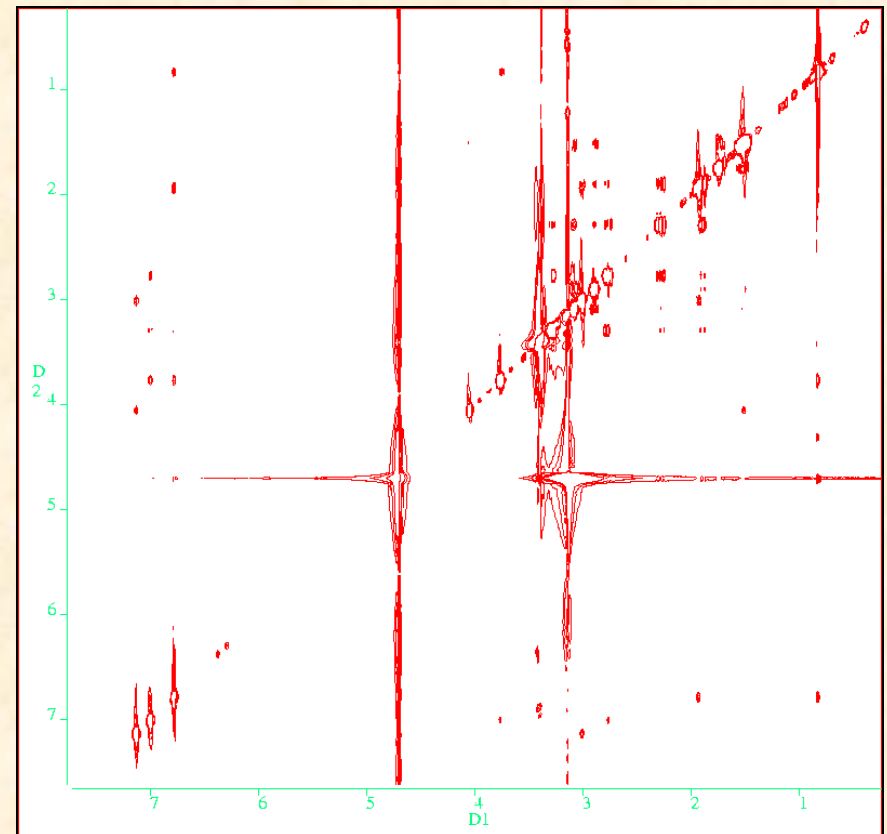


A mért NMR spektrumok (TFEd₂ oldószerben)

TOCSY

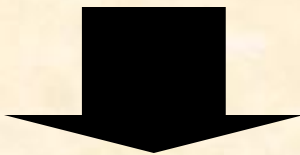


NOESY



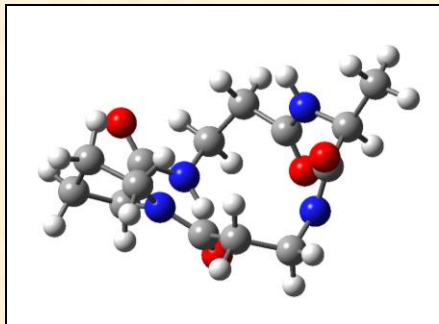
Szerkezetszámolás

0. NMR kényszerfeltételek alapján
1. szemiemperikus (AM1) optimalizálás
2. finomítás ab initio (RHF/3-21G) módon
3. végső finomítás és frekvenciaszámolás (B3LYP/6-31G(d))

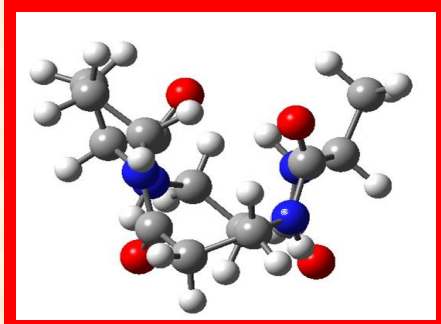


Tizenkét szerkezethez jutottunk

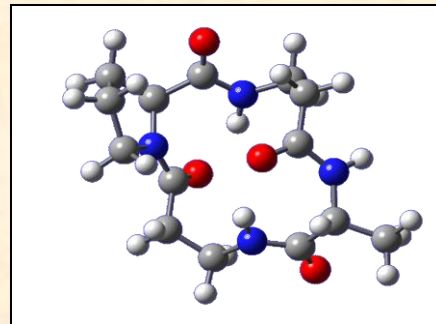
1. konformer
 $\Delta E=0,0 \text{ kcal}\cdot\text{mol}^{-1}$



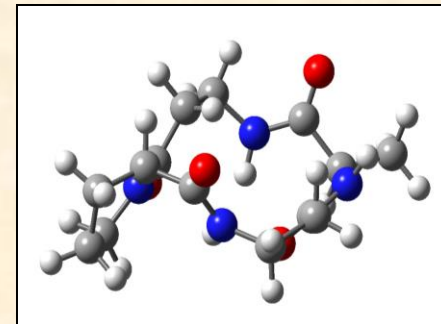
2. konformer
 $\Delta E=2,7 \text{ kcal}\cdot\text{mol}^{-1}$



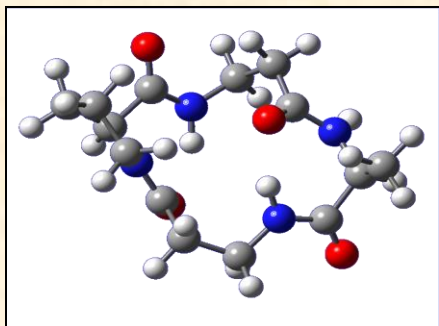
3. konformer
 $\Delta E=5,0 \text{ kcal}\cdot\text{mol}^{-1}$



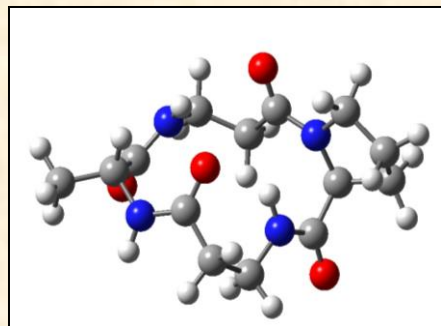
4. konformer
 $\Delta E=5,3 \text{ kcal}\cdot\text{mol}^{-1}$



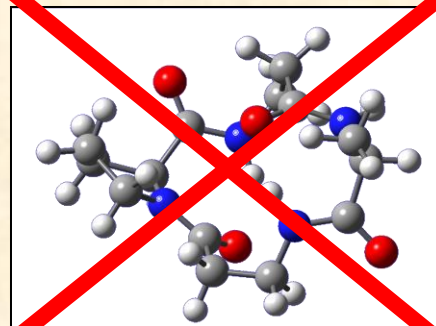
5. konformer
 $\Delta E=5,8 \text{ kcal}\cdot\text{mol}^{-1}$



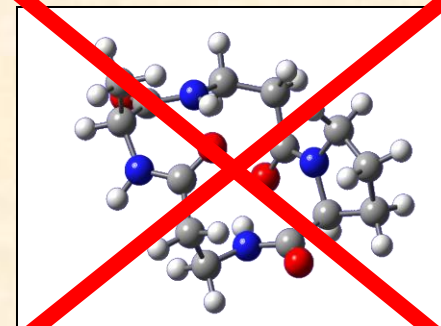
6. konformer
 $\Delta E=5,9 \text{ kcal}\cdot\text{mol}^{-1}$



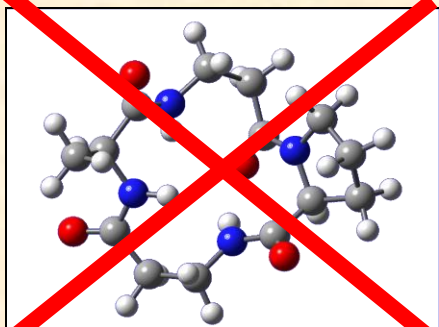
7. konformer
 $\Delta E=7,5 \text{ kcal}\cdot\text{mol}^{-1}$



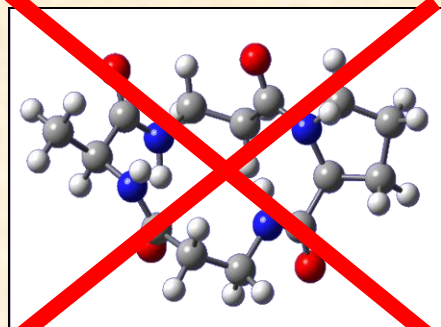
8. konformer
 $\Delta E=7,5 \text{ kcal}\cdot\text{mol}^{-1}$



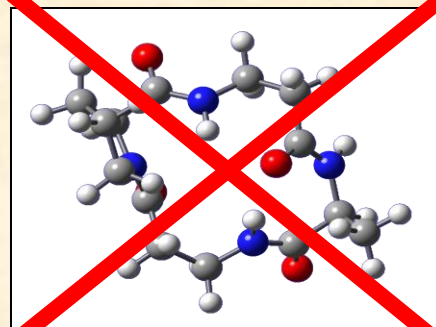
9. konformer
 $\Delta E=9,6 \text{ kcal}\cdot\text{mol}^{-1}$



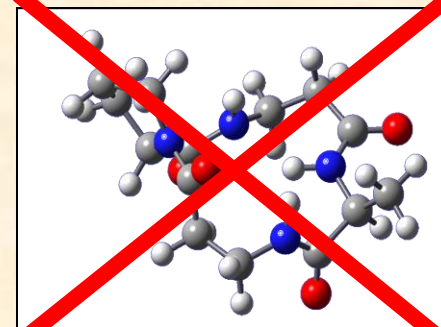
10. konformer
 $\Delta E=11,6 \text{ kcal}\cdot\text{mol}^{-1}$

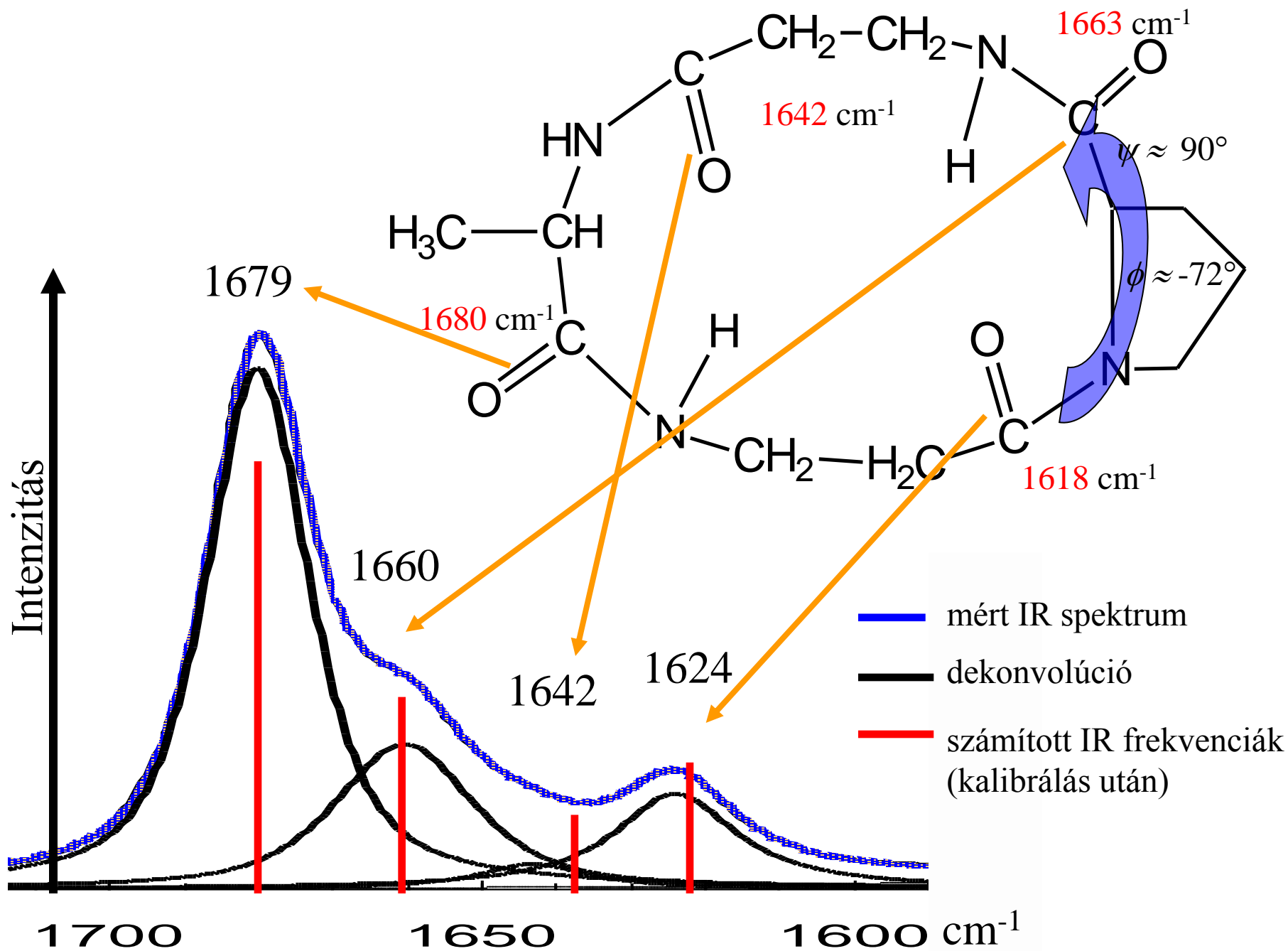


11. konformer
 $\Delta E=12,0 \text{ kcal}\cdot\text{mol}^{-1}$

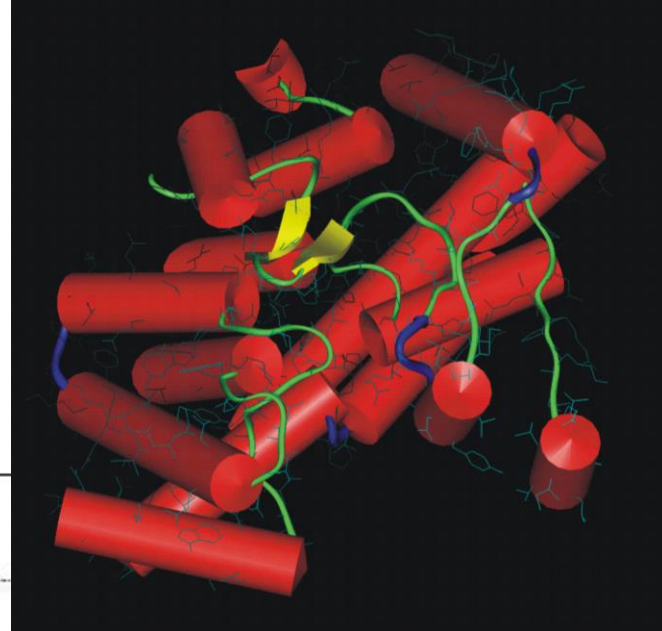


12. konformer
 $\Delta E=17,0 \text{ kcal}\cdot\text{mol}^{-1}$





Citrát szintáz



γ -kanyar

β -redő

α -hélix

β -kanyar

