

УДК 577.150.2

СТРУКТУРА α -СПИРАЛЬНЫХ ШПИЛЕК С КОРОТКИМИ ПЕРЕТЯЖКАМИ В ГЛОБУЛЯРНЫХ БЕЛКАХ

© 2001 г. Е. В. Бражников, А. В. Ефимов*

Институт белка Российской академии наук, Пуцзино, Московская обл., 142290

Поступила в редакцию 04.06.2000 г.

Проведен анализ конформаций более 100 α - α -шпилек с плотной упаковкой спиральных сегментов и длиной перетяжки до 4 аминокислотных остатков в глобулярных белках. Выявлены 5 типов перетяжек, которые охарактеризованы значениями углов внутреннего вращения ϕ и ψ на карте Рамачандрана. Показано, что каждый тип α - α -шпилек имеет уникальное распределение гидрофобных и гидрофильных остатков в кодирующих их аминокислотных последовательностях.

Ключевые слова: конформационный анализ, структура белков, α -спиральные шпильки.

Различные комбинации элементов вторичной структуры со специфической укладкой полипептидной цепи довольно часто встречаются в белковых структурах. Такие блоки принято называть супервторичной структурой или структурными мотивами [1]. В глобулярных белках встречаются как простые структурные мотивы, состоящие из двух последовательно соединенных регулярных участков полипептидной цепи, так и сложные, состоящие из трех и более участков. Из сложных мотивов наиболее подробно изучены β - α - β -мотив, встречающийся почти в каждой белковой структуре с параллельной β -формой, укладка полипептидной цепи по Россману, abcd-единица, ABCD-структура, 3β -уголок. Из простых мотивов в белках наиболее часто встречаются α - α и β - β -шпильки, α - α - и β - β -уголки, L- и V-образные структуры из двух α -спиралей.

В белках некоторые мотивы встречаются только в правой форме, другие могут быть как правыми, так и левыми, в зависимости от взаимного расположения участков полипептидной цепи [2–5].

α - α -Шпильки широко распространены в глобулярных белках; существуют белки, состоящие преимущественно из такого мотива [6–8]. Шпильки различаются длиной спиралей, а также длиной и конформацией участка полипептидной цепи между ними, называемого перетяжкой. Угол Ω между осями спиралей может также изменяться в небольших пределах. Перетяжка относится к неупорядоченной части молекулы и, в принципе, каждый аминокислотный остаток в ней может иметь конформацию из разрешенных областей на карте Рамачандрана.

*Эл. почта: efimov@protres.ru

Для описания конформации перетяжки мы будем следовать способу, предложенному одним из нас ранее [9]. Этот способ в настоящее время широко используется для описания структуры нерегулярных участков в глобулярных белках [10–15].

Стереохимический анализ α - α -шпилек был проведен ранее [16], но из-за недостатка экспериментальных данных в то время не все результаты анализа могли быть подтверждены примерами из известных белков. Поэтому поиск в Банке белковых структур (PDB) α -спиральных шпилек с короткими перетяжками и детальный анализ их структуры были основными задачами настоящей работы. В результате нами отобраны из негомологичных белков и проанализированы более 100 α - α -шпилек, имеющих перетяжки из 4 и менее аминокислотных остатков. Показано, что в таких шпильках встречаются всего 5 типов перетяжек, каждый из которых характеризуется определенными числом и конформацией остатков. В работе рассмотрена взаимосвязь между структурой α -спиральных шпилек и распределением вдоль цепи гидрофобных, гидрофильных и глициновых остатков.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Самой распространенной в белках α -шпилькой является шпилька с конформацией перетяжки $\gamma\alpha_L\beta/\delta$, где β/δ означает, что этот остаток может иметь β - или δ -конформацию (табл. 1). Во всех 46 шпильках такого типа в γ -положении чаще всего встречаются Glu (9 раз), Leu (7 раз), Thr и Ala (по 5 раз). Совсем не встречаются Gly, Pro, Cys, Asp и Phe. В α_L -положении преимущественно встречается Gly (24 раза) и гидрофильные остатки с гибкими боковыми цепями (Asp, Glu, Lys, Asn, Arg). Совсем нет остатков с массивными гид-

Таблица 1. Конформация $\alpha_L\beta/\delta$ -перетяжки

Код PDB	а. о.	φ	ψ	а. о.	φ	ψ	а. о.	φ	ψ	Разр., Å
14PS	A16	-73	20	E17	45	39	R18	-110	88	2.6
14PS	L182	-83	-19	N183	70	137	S184	-122	87	2.6
1A17	A41	-95	15	K42	65	12	D43	-93	79	2.45
1A17	T75	-104	19	E76	60	25	C77	-94	77	2.45
1A17	L109	-84	1	G110	82	-1	K111	-89	78	2.45
1A1W	L70	-73	-14	R71	69	39	R72	-86	-171	NMR
1A59	Y293	-87	1	D294	52	64	R295	-138	71	2.09
1A1Z	K70	-66	-15	R71	73	29	R72	-100	95	NMR
1E2A	N33	-93	7	G34	83	3	D35	-87	73	2.3
1AH7	N103	-87	5	K104	66	26	D105	-98	85	1.5
1AM7	R110	-82	7	G111	95	9	D112	-90	69	2.3
1AUE	E2042	-111	6	R2043	49	45	N2043	-119	98	2.33
1AWC	A16	-76	14	G17	70	41	Q18	-102	78	2.15
1AWC	Y48	-84	-6	G49	80	36	H50	-93	90	2.15
1AWC	E81	-83	-10	G82	82	17	H83	-84	81	2.15
1AWC	H114	-100	15	N115	56	35	H116	-89	77	2.15
1AWC	N147	-98	-2	G148	69	21	N149	-96	89	2.15
1B0J	T283	-113	31	G284	64	32	R285	-128	35	2.5
1B89	V21	-67	-21	S22	60	53	N23	-100	68	2.6
1B8J	A332	-69	-6	A333	59	45	N334	-123	96	1.9
1BCF	W35	-38	-9	G36	96	7	L37	-88	79	2.9
1BD8	R18	-81	-14	G19	79	22	D20	-83	90	1.8
1BD8	T84	-95	0	G85	83	18	F86	-88	82	1.8
1BD8	R149	-78	-15	G150	80	22	A151	-86	78	1.8
1BDJ	A704	-75	-17	Q705	63	37	D706	-84	103	2.68
1BED	L79	-93	2	E80	54	24	V81	-100	27	2.1
1BF3	E319	-119	10	G320	60	22	R321	-95	55	2.2
1BGF	E74	-79	-10	K75	57	40	N76	-87	92	1.45
1BGJ	E319	-77	-3	G320	56	35	R321	-117	70	3.0
1BI7	E88	-93	-5	G89	82	9	F90	-84	83	3.4
1BI7	L121	-63	-11	G122	89	27	H123	-86	71	3.4
1BKE	H247	-52	-17	G248	90	6	D249	-88	106	3.15
1BL5	M367	-66	-21	G368	106	1	W369	-92	57	2.5
1BLX	E117	-92	-9	G118	98	12	H119	-90	97	1.9
1BLX	T84	-81	-18	G85	91	13	F86	-88	98	1.9
1BPO	Q442	-77	-31	G443	96	31	R444	-104	123	2.6
1BUO	L109	-74	-13	E110	58	56	I111	-108	98	1.9
1BXL	K157	-97	27	E158	55	52	M159	-131	56	NMR
1QSP	E53	-70	-13	K54	52	47	N55	-92	110	2.7
256B	E81	-94	8	G82	79	10	K83	-93	71	1.4
103L	Q123	-82	8	K124	50	35	R125	-90	80	1.9
1COL	T127	-116	1	G128	67	17	N129	-106	110	2.4
1ERC	Q9	-84	-5	C10	76	45	V11	-139	107	NMR
1ERD	S11	-84	-11	C12	72	11	E13	-87	80	NMR
1ROP	L29	-90	-1	D30	57	38	A31	-94	89	1.7
1WAS	N143	-101	36	G144	63	-20	N145	-61	52	2.7
Ср. значение угла		-84	-2		71	29		-98	76	
Конформация остатка		γ			α_L			β/δ		

Примечание. а. о. – аминокислотный остаток.

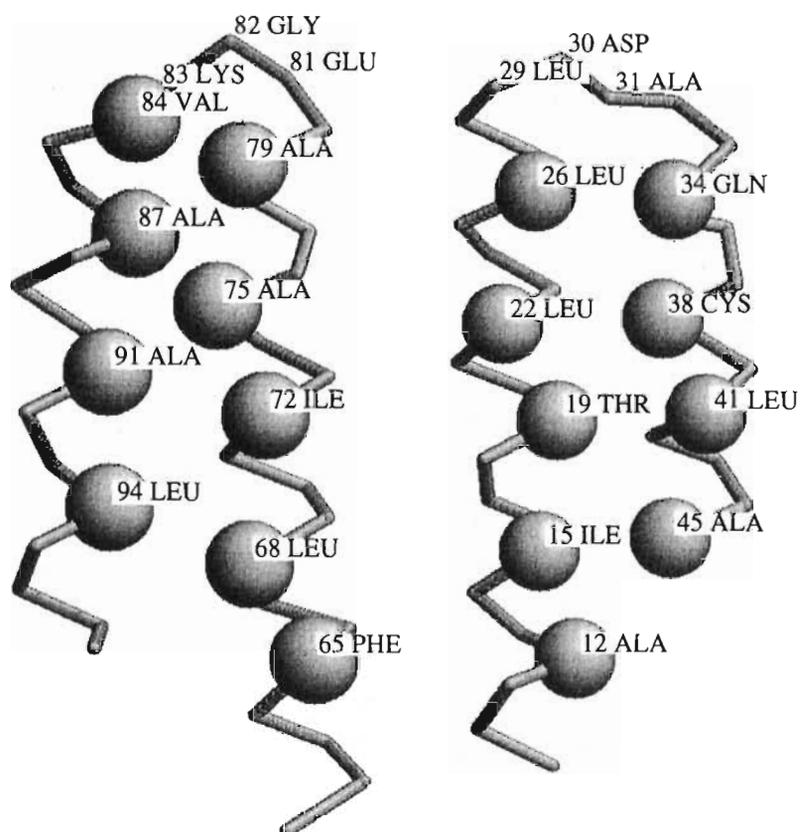


Рис. 1. α -Спиральные шпильки с перетяжками типа $\alpha_1\beta/\delta$. Слева показана левая шпилька из цитохрома B562 (PDB код 256B), справа – правая шпилька из ROP-белка (PDB код 1ROP). Серыми шарами представлены гидрофобные боковые цепи, образующие минимальные гидрофобные кластеры α -спиралей.

рофобными группами (Phe, Tyr, Trp, Val, Met, Ile). В β/δ -положении, наоборот, Gly отсутствует, а остатки с массивными гидрофобными группами также почти не встречаются, что подтверждает полученные ранее результаты стереохимического анализа. Массивным гидрофобным остаткам запрещено находиться в β/δ -положении, чтобы не было дегидратации главной цепи на N-конце второй спирали [16].

Такую конформацию перетяжки могут иметь как левые, так и правые шпильки (рис. 1). Однако, несмотря на сходство конформаций полипептидных остовов, правые и левые шпильки существенно различаются распределением вдоль цепи гидрофобных, гидрофильных и глициновых остатков (см. [16], а также рис. 6). Отметим также, что α -спирали в этих шпильках упакованы “бок о бок” в соответствии с принципом плотной упа-

Таблица 2. Конформация ψ -перетяжки

Код PDB	а. о.	ϕ	ψ	а. о.	ϕ	ψ	Разр., Å
1AG1	I198	-93	-73	G199	178	152	2.36
1BKA	L320	-63	-35	G321	96	139	2.4
1BLF	L320	-72	-37	G321	83	147	2.8
1LNF	T296	-132	-3	G297	97	141	1.7
1COL	L30	-98	-16	G31	98	176	2.4
2CCY	A102	-80	-29	G103	135	169	1.67
Ср. значение угла		-90	-32		114	154	
Конформация остатка			γ			ϵ	

Примечание. а. о. – аминокислотный остаток.

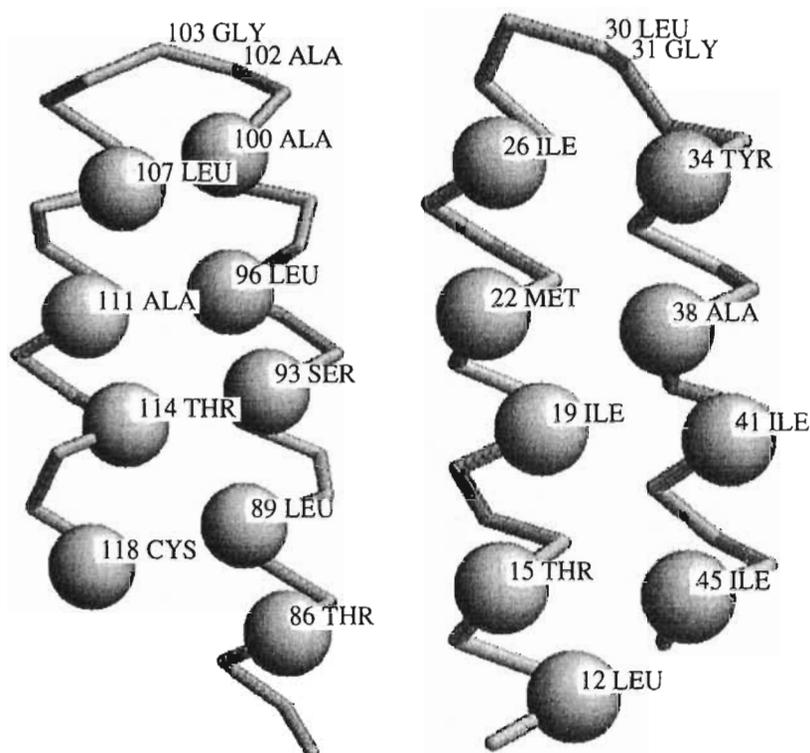


Рис. 2. α -Спиральные шпильки с перетяжками типа $\gamma\epsilon$. Слева показана левая шпилька из цитохрома С (PDB код 2CCY), справа – правая шпилька из колицина А (PDB код 1COL). Обозначения соответствуют рис. 1.

ковки [17], т.е. “выступы” минимального гидрофобного кластера одной спирали входят во “впадины” гидрофобного кластера другой спирали (см. рис. 1).

Перетяжка $\gamma\epsilon$ самая короткая, поэтому здесь имеют место наиболее жесткие стерические ограничения. Встречается она редко. Мы обнаружили только 6 таких перетяжек (табл. 2). Во всех случаях в ϵ -положении находится только Gly, а в γ -положении, как и для шпильки с $\gamma\alpha_L\beta/\delta$ -перетяжкой, находятся Leu, Ala, Thr и Ile. Порядок чередования гидрофобных и гидрофильных остатков в этой структуре такой, что образуется комплементарная упаковка α -спиралей по принципу “выступ во впадину”. Для левой и правой шпилек аминокислотная последовательность ключевых остатков разная (рис. 2, см. также рис. 6).

Перетяжка $\gamma\alpha_L\beta$ найдена в 22 белках (табл. 3). Особенности в γ -положении для этого типа шпильки не обнаружено. Здесь могут быть как гидрофобные, так и гидрофильные остатки. В α_L -положении в 13 случаях находится Gly, а в остальных шпильках обнаружены гидрофильные остатки с гибкой боковой цепью. Остаток в первом β -положении почти всегда гидрофобен. Второе β -положение всегда занято гидрофильным остатком или остатком с короткой боковой цепью (Gly, Ala, Pro). Из рис. 3 и суммарной схемы распределения гид-

рофильных и гидрофобных остатков видно, что расположение в цепи ключевых гидрофобных и гидрофильных остатков для левой и правой шпилек различно.

Шпилька с $\gamma\beta\gamma\beta$ -перетяжкой обнаружена в 18 белках (табл. 4). В этой шпильке в первом γ -положении отсутствуют гидрофобные ароматические остатки, и это положение, в основном, занимают гидрофильные остатки или небольшие гидрофобные остатки. Первый остаток в β -положении почти всегда гидрофобен, но могут встречаться полярные остатки с короткими боковыми цепями (Asp, Asn, Ser, Thr). Во втором β -положении отсутствуют Gly и гидрофобные остатки с массивными боковыми цепями. Второе β -положение, как правило, занято заряженными остатками и в одном случае Gly. Для этого типа шпилек обнаружены только левые шпильки. На рис. 4 показана также шпилька, близкая по структуре к правой, но можно видеть, что в комплементарную гидрофобную полосу включены 3 гидрофильных остатка, которые участвуют во взаимодействии своими гидрофобными частями.

Перетяжка типа $\gamma\beta\beta$ встречается в 15 белках (табл. 5). В β -положении встречаются остатки различной структуры, однако нет ни одного остатка Gly. В первом β -положении находятся только гидрофобные остатки, а также Ser и Thr, которые

Таблица 3. Конформация $\alpha_L\beta\beta$ -перетяжки

Код PDB	а. о.	ϕ	ψ	а. о.	ϕ	ψ	а. о.	ϕ	ψ	а. о.	ϕ	ψ	Разр., Å
1A18	V23	-70	-11	G24	95	30	V25	-80	133	G26	-60	-143	2.4
1A6D	Q116	-67	-25	G117	119	12	V118	-78	135	H119	-74	131	3.6
1A26	D722	-99	8	G723	64	49	G724	-77	171	S725	-55	146	3.0
1A2D	V23	-65	-33	G24	114	13	V25	-67	150	G26	-75	139	2.4
1A80	E175	-104	4	Q176	46	48	A177	-62	140	S178	-75	178	1.7
1AB0	V23	-69	-22	G24	110	22	V25	-77	128	G26	-60	150	1.9
1AH6	A110	-72	-17	G111	120	-3	A112	-51	145	D113	-73	135	1.8
1AIS	L1123	-86	-13	K1124	66	33	L1125	-62	132	P1126	-69	161	2.1
1AL6	E160	-82	-10	G161	95	20	I162	-49	142	N163	-66	139	1.85
1AMZ	A254	-91	2	L255	82	17	S256	-65	147	D257	-70	165	1.8
1AUM	E175	-99	4	Q176	46	46	A177	-63	145	S178	-78	177	3.0
1AWP	L61	-77	-14	G62	73	66	H63	-72	150	S64	-77	166	2.0
1B5M	V61	-115	-8	G62	60	113	H63	-12	140	S64	-67	180	2.7
1BOU	W64	-105	5	N65	46	53	L66	-86	163	T67	-76	156	2.2
1BM8	A43	-77	3	N44	70	28	F45	-86	137	A46	-71	160	1.71
1BRX	V101	-93	9	D102	57	62	A103	-79	163	D104	-85	169	2.3
1BU2	F66	-102	-7	E67	50	48	L68	-82	161	D69	-44	146	3.0
1BYQ	A124	-106	8	G125	102	6	A126	-68	151	D127	-77	138	1.5
1UTG	F28	-96	-7	E29	53	61	P30	-62	140	D31	-64	170	1.34
2IFB	M21	-75	-8	G22	71	28	I23	-84	144	N24	-70	154	2.0
1PMP	L23	-92	-16	G24	106	6	V25	-63	139	G26	-92	149	2.7
2CTS	E160	-99	25	G161	41	63	I162	-67	163	H163	-72	126	2.0
Ср. значение угла		-88	-6		76	37		-76	146		-70	153	
Конформация остатка			γ			α_L			β			β	

Примечание. а. о. – аминокислотный остаток.

Таблица 4. Конформация $\gamma\beta\beta$ -перетяжки

Код PDB	а. о.	ϕ	ψ	а. о.	ϕ	ψ	а. о.	ϕ	ψ	а. о.	ϕ	ψ	Разр., Å
1A5T	T304	-18	78	G305	-25	103	I306	-18	-34	N307	-118	80	2.2
1A6J	A142	-94	-25	A143	-49	143	Q144	-114	-3	S145	-138	153	2.35
1A37	V132	-74	-45	A133	-48	170	A134	-145	-67	G135	-68	165	3.6
1A3A	H133	-121	-6	T134	-64	152	T135	-111	8	S136	-111	122	1.8
1A7V	T95	-103	-16	I96	-90	99	K97	-108	-23	D98	-153	180	2.3
1AGR	K100	-101	11	I101	-76	140	K102	-116	-33	S103	-93	155	2.8
1A13	A305	-71	-46	L306	-51	161	R307	-114	-56	S308	-77	115	1.8
1BIN	K455	-104	-1	V456	-114	153	A457	-118	41	D458	-134	128	1.8
1B3U	R20	-92	-3	N21	-69	166	E22	-101	-22	D23	-82	100	2.3
1BKA	D117	-90	-24	L218	-107	95	S219	-38	-61	D220	-99	132	2.4
1BL0	E74	-105	6	S75	-165	172	N76	-112	15	E77	-51	121	2.3
1BLF	N217	-106	-23	L21	-128	90	P219	-56	-39	E220	-94	148	2.8
BUK	L580	-68	-19	S581	-61	157	D582	-113	-6	S583	-133	145	2.5
1B9J	K455	-98	-6	V456	-110	155	A457	-117	42	D458	-142	126	1.8
256B	K19	-97	0	A20	-61	145	D21	-104	-18	N22	-147	178	1.4
2HMQ	Q37	-74	40	A38	-157	110	D39	-79	79	N40	-127	177	1.6
1HC2	Q92	-111	45	C93	-88	152	K94	-79	-46	E95	-146	170	3.2
2MHR	R37	-70	-38	D38	-150	95	N39	-79	68	S40	-112	166	1.7
Ср. значение угла		-89	-4		-90	136		-96	-9		-112	124	
Конформация остатка			γ			β			γ			β	

Примечание. а. о. – аминокислотный остаток.

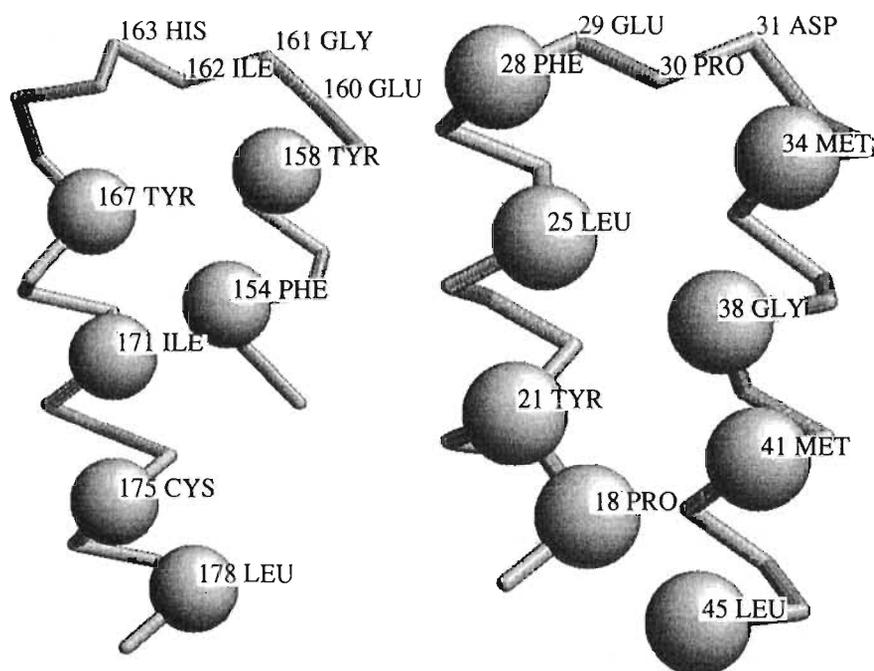


Рис. 3. α -Спиральные шпильки с перетяжками типа $\gamma\alpha_L\beta\beta$. Слева показана левая шпилька из цитратсинтазы (PDB код 2CTS), справа – правая шпилька из утероглобина (PDB код 2UTG). Обозначения такие же, как на рис. 1.

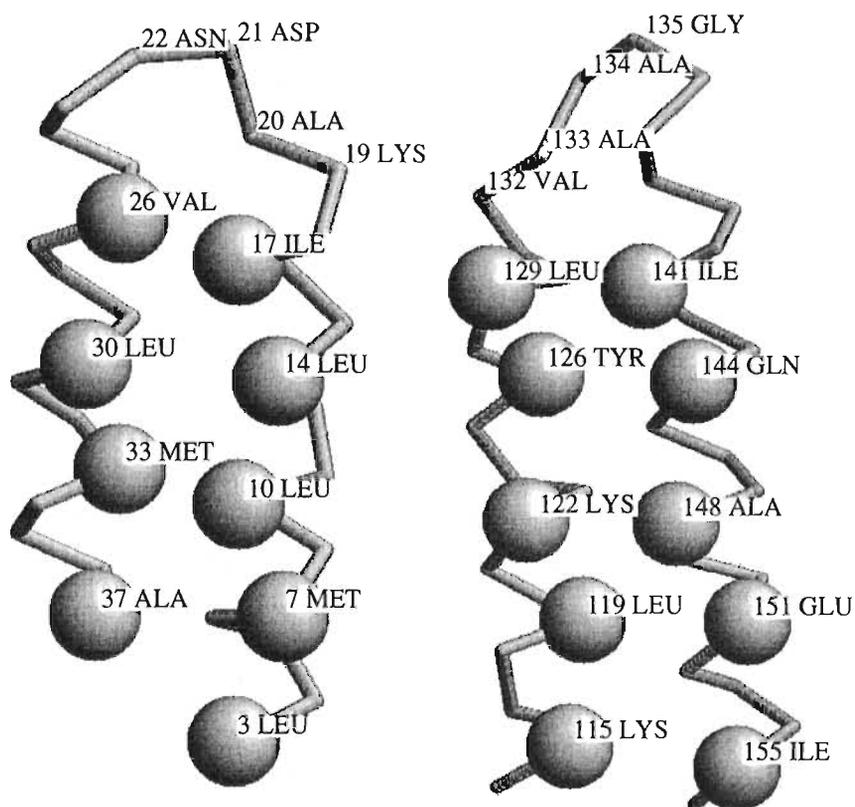


Рис. 4. α -Спиральные шпильки с перетяжками типа $\gamma\beta\beta$. Слева показана левая шпилька из цитохрома B562 (PDB код 256B), справа – правая шпилька из 14-3-3 белка ZETA (PDB код 1A37). Обозначения такие же, как на рис. 1.

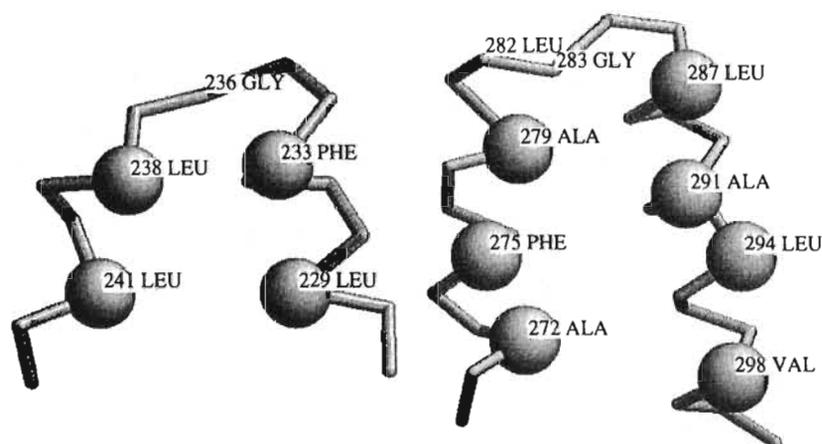


Рис. 5. α -Спиральные шпильки с перетяжками типа $\gamma\beta$. Слева показана левая шпилька из альфа-амилазы (PDB код 1AQH), справа – правая шпилька из цитратсинтазы (PDB код 1AJ8). Обозначения такие же, как на рис. 1.

в некоторых случаях можно относить к гидрофобным остаткам, поскольку они могут взаимодействовать с атомами главной цепи. Во втором β -положении должны быть гидрофильные остатки или остатки с небольшими боковыми цепями. Однако в двух случаях в этом положении находится Phe, что, по-видимому, энергетически невыгодно [16]. В большинстве случаев эту структуру образуют короткие спирали. Распределение гидрофобных и гидрофильных остатков показано на рис. 5 и 6.

Суммарная схема распределения гидрофобных и гидрофильных остатков для всех типов

α -спиральных шпилек, рассмотренных в работе, представлена на рис. 6. Видно, что это распределение характерно для каждого вида шпильки и различно для левой и правой шпилек одного типа.

В данной работе рассмотрены α -спиральные шпильки с длиной перетяжки не более 4 аминокислотных остатков. Обнаружено, что существует только пять таких шпилек. Эти результаты хорошо согласуются с выводами проведенного ранее стереохимического анализа [16], а также с наблюдениями других авторов [10–15], сделанными на основе статистического анализа.

Таблица 5. Конформация $\gamma\beta$ -перетяжки

Код PDB	а. о.	ϕ	ψ	а. о.	ϕ	ψ	а. о.	ϕ	ψ
1AE9	S194	-102	17	S195	-97	167	P196	-59	148
1AF2	Q11	-98	2	L12	-79	160	A13	-64	147
1AJ8	L282	-114	-18	G83	-77	162	D163	-64	131
1AL7	K16	-115	-29	L17	-74	155	P18	-71	146
1ALN	Q11	-84	-1	L12	-84	158	A13	-63	143
1AQH	N235	-117	0	G236	-12	-151	S237	-118	137
1ASS	144	-89	0	S45	-75	147	D46	-67	135
1AVC	E420	-83	-17	L421	-109	159	S422	-154	161
1B3U	A40	-48	-35	L41	-92	152	G42	-75	174
1BER	F136	-106	-46	L137	-77	156	D138	-96	171
1BHD	K204	-70	-12	M205	-77	162	S206	80	160
1BHP	R19	-129	-7	G20	-119	165	A21	-77	161
1AXN	E148	-108	4	T149	-142	169	S150	-155	-180
Ср. значение угла		-97	-8		-85	137		-92	132
Конформация остатка			γ			β			β

Примечание. а. о. – аминокислотный остаток.

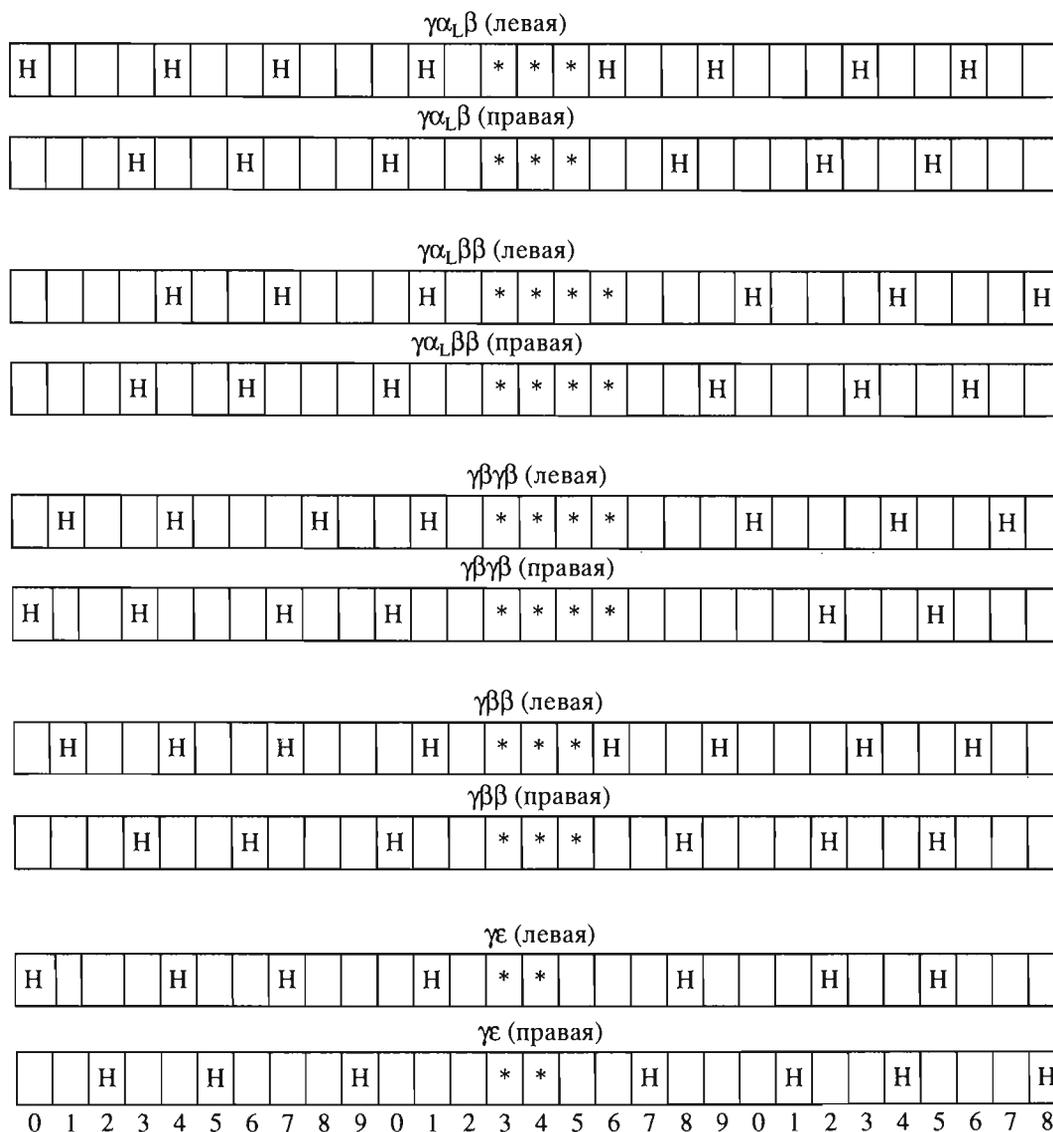


Рис. 6. Распределение гидрофобных и гидрофильных аминокислотных остатков в идеальных α -спиральных шпильках. (* – перетяжка; H – гидрофобные остатки, образующие необходимый гидрофобный кластер; пустые клетки – гидрофильные аминокислотные остатки. Цифрами обозначены условные номера остатков.)

Все 5 типов перетяжек имеют первый аминокислотный остаток в γ -конформации; средние значения углов внутреннего вращения для них практически совпадают. Небольшое отличие этих углов для шпильки с перетяжкой $\gamma\epsilon$ обусловлено тем, что в этом случае остатки в перетяжке находятся в стерически напряженном состоянии. Отметим также, что в шпильке с конформацией $\gamma\beta\gamma\beta$ средние значения углов ϕ и ψ для первого и второго β -остатков практически совпадают. Средние значения β -конформации для разных перетяжек несколько различаются, и это не удивительно, поскольку β -область является самой обширной на карте Рамачандрана. В случае шпильки с конформацией перетяжки $\gamma\alpha_L\beta/\delta$ последний остаток

имеет углы внутреннего вращения в большинстве случаев из области δ .

Глобулярные белки плотно упакованы и имеют гидрофобное ядро, окруженное полярной оболочкой, и α -спиральные шпильки, входящие в их структуру, должны образовываться в соответствии с этими принципами. Так, одна сторона шпильки должна быть гидрофобной, а другая – гидрофильной, если шпилька находится на поверхности белка. У шпильки обе стороны могут быть гидрофобными, если она полностью погружена в гидрофобное ядро. Для образования гидрофобной поверхности α -спирали в составе шпильки образуют упаковку “бок о бок” (side by side) по принципу “выступ во впадину” [17]. Для образования необходимого или минимального ги-

гидрофобного кластера каждой α -спирали требуется определенная последовательность гидрофобных и гидрофильных остатков. На рис. 1–5 можно видеть аминокислотные остатки, образующие необходимые гидрофобные кластеры (отмечены темными шарами). В большинстве случаев, особенно если спирали достаточно длинные, выступы в кластере одной спирали соответствуют впадине другой, обеспечивая тем самым плотную упаковку структуры.

Проведенный ранее стереохимический анализ α -спиральных шпилек с короткими перетяжками [16] и их свойства, изученные в этой работе, позволяют предположить, что этот структурный мотив может сворачиваться независимо и может быть “зародышем” или готовым “строительным блоком” в процессе сворачивания белков. При моделировании белков α -спиральные шпильки могут использоваться как стартовые структуры, с помощью которых полные структуры получают добавлением к ним остальных элементов.

Работа поддержана грантом Российского фонда фундаментальных исследований (98-04-48252).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Efimov A.V. // Structure. 1994. V. 2. P. 999–1002.
2. Sternberg M.J.E., Thornton J.M. // J. Mol. Biol. 1976. V. 105. P. 367–382.
3. Efimov A.V. // Progr. Biophys. Mol. Biol. 1993. V. 60. P. 201–239.
4. Efimov A.V. // Protein Structure by Distance Analysis / Eds. Bohr H., Brunak S. Amsterdam–Oxford–Washington–Tokyo–Osaka–Kyoto: IOS Press and Ohmsha, 1994. P. 187–200.
5. Ефимов А.В. // Биоорганич. химия. 1997. Т. 23. С. 243–250.
6. Batchelor A.H., Piper D.E., Charles de la Brousse F., McKnight S.L., Wolberger C. // Science. 1998. V. 279. P. 1037–1041.
7. Venkataramani R., Swaminathan K., Marmorstein R. // Nature Struct. Biol. 1998. V. 5. P. 74–78.
8. Groves M.R., Hanlon N., Turowski P., Hemmings B., Barford D. // Cell. 1999. V. 96. P. 99–110.
9. Ефимов А.В. // Молекуляр. биология. 1986. Т. 20. С. 250–260.
10. Oliva B., Bates P.A., Querol E., Aviles F.X., Sternberg M.J.E. // J. Mol. Biol. 1997. V. 266. P. 814–830.
11. Donate L.E., Rufino S.D., Canard L.H.J., Blundell T.L. // Protein Sci. 1996. V. 5. P. 2600–2616.
12. Rufino S.D., Donate L.E., Canard L.H.J., Blundell T.L. // J. Mol. Biol. 1997. V. 267. P. 352–367.
13. Kwasigroch J.-M., Chomilier J., Mornon J.-P. // J. Mol. Biol. 1996. V. 259. P. 855–872.
14. Getha V., Munson P.J. // Protein Sci. 1997. V. 6. P. 2538–2547.
15. Aurora R., Rose G.D. // Protein Sci. 1998. V. 7. P. 21–38.
16. Efimov A.V. // Protein Eng. 1991. V. 4. P. 245–250.
17. Efimov A.V. // FEBS Lett. 1999. V. 463. P. 3–6.

Structure of α -Hairpins with Short Connections in Globular Proteins

E. V. Brazhnikov and A. V. Efimov

The analysis of conformations of more than 100 α - α -hairpins with closely packed helical segments and connections up to four amino acid residues in length was carried out. Five types of the connections were revealed and their ϕ and ψ values on the Ramachandran map were found. Each type of α - α -hairpins was shown to have a unique sequence pattern for hydrophobic and hydrophilic residues.