

УДК 577.3
ББК 28.071
Ф 598

Интернет-магазин

MATHESIS

<http://shop.rcd.ru>

• физика
• математика
• биология
• нефтегазовые
технологии

Финкельштейн А. В.

Физика белковых молекул. — М.–Ижевск: Институт компьютерных исследований, 2014. — 424 с.

Предлагаемая книга обобщает результаты фундаментальных исследований и — в частности — исследований ее авторов по проблемам биофизики белков. Она охватывает разнообразные аспекты физики белковых молекул: от классификации и принципов устройства пространственных структур белков (мембранных, фибриллярных и, в особенности, лучше всего изученных водорастворимых глобулярных белков) — до принципов функционирования белков и устройства их активных центров; от элементарных взаимодействий в белках и их (белков) взаимодействия со средой — до конформационных переходов в белках, полипептидах и синтетических полимерах. Большое внимание уделено самоорганизации белков (как и *in vivo*, так и, в особенности, *in vitro*), интермедиатам (типа открытой О. Б. Птицыным и его сотрудниками «расплавленной глобулы») и ядрам сворачивания белков, а также белковой инженерии и дизайну и принципам кодирования структуры белка его аминокислотной последовательностью.

Книга предназначена для широкого круга студентов, аспирантов и научных сотрудников — биологов, медиков, биохимиков, биофизиков.

ISBN 978-5-4344-0193-7

ББК 28.071

© А. В. Финкельштейн, 2014

© АНО «Ижевский институт компьютерных исследований», 2014

<http://shop.rcd.ru>
<http://ics.org.ru>

Оглавление

Предисловие, благодарности и предварительные замечания	9
ГЛАВА 1. Введение	11
ГЛАВА 2. Аминокислотные остатки и полипептидные цепи	25
Аминокислотные остатки	25
Валентные связи и атомы	26
Карты Рамачандрана.....	34
ГЛАВА 3. Вторичные структуры полипептидных цепей	41
Строение вторичных структур.....	41
Флуктуирующий клубок	48
Экспериментальное наблюдение вторичных структур	50
Аминокислотные остатки и вторичные структуры.....	52
Термодинамика образования α - и β -структур из клубка.....	57
Кинетика образования α - и β -структур из клубка	63
ГЛАВА 4. Фибриллярные белки	75
α - и β -структурные фибриллярные белки	75
Коллаген	79
«Ошибочное» сворачивание фибриллярных белков, амилоиды и болезни	82
ГЛАВА 5. Мембранные белки	87
Устройство и работа мембранных белков	87
Туннельные переходы	96
ГЛАВА 6. Водорастворимые глобулярные белки	101
β -структурные глобулярные белки	105
α -структурные глобулярные белки	115
Глобулярные белки типа α/β и $\alpha+\beta$	122
Правовинтовой ход перемычек, соединяющих β -участки	127
ГЛАВА 7. Типичные структуры глобулярных белков и квазислучайные аминокислотные последовательности	131
Классификация мотивов укладки белковых цепей	131
Видим ли мы эволюцию структур белков?.....	134
«Типовые мотивы» и «дефекты» укладки белковых цепей	137
Типовые структуры и «случайные» аминокислотные последовательности	148

Квази-больцмановская статистика дефектов белковых архитектур.....	152
Глобулярные белки возникли как «отобранные» случайные полипептиды?	164
ГЛАВА 8. Денатурации и самоорганизации белков: структурные и термодинамические аспекты	169
Нативно-неупорядоченные белки.....	169
Кооперативные переходы при денатурации белков	170
Как выглядит денатурированный белок?.....	177
Расплавленная глобула	181
Переход «глобула–клубок» в обычных гомополимерах	183
Почему денатурация белка происходит как переход «всё или ничего»?	187
Различия в плавлении «отобранного» гетерополимера (с энергетической щелью) и «случайного» гетерополимера	193
ГЛАВА 9. Кинетические аспекты денатурации и самоорганизации белков	203
Образование структуры белка <i>in vivo</i>	203
Самоорганизация структуры белка <i>in vitro</i>	205
Механизмы, помогающие образованию структуры белка <i>in vivo</i> ..	207
Загадочность спонтанной самоорганизации белков.	
Парадокс Левинтала	210
Стадии и интермедиаты в самоорганизации белков	211
Одностадийное сворачивание небольших белков	214
Ядро сворачивания нативной структуры белка	222
ГЛАВА 10. Теория самоорганизации глобулярных белков	233
ГЛАВА 11. Предсказание и дизайн белковых структур	255
Предсказание структур белков по их аминокислотным последовательностям	255
Белковая инженерия	268
Конструирование белковых молекул	272
ГЛАВА 12. Физические основы функционирования белков	281
Функция белка и его структура	281
Ферменты — белки, катализирующие биохимические реакции ..	288
Сочетание ферментативных функций.....	298
Относительная независимость структуры белка от его элементарной ферментативной активности	299
Сопряжение элементарных функций белка и гибкость его структуры. Индуцированное соответствие и подвижность доменов белка	302

Аллостерия — взаимодействие активных центров.....	308
Механохимические функции белков.....	311
Приложения	325
А. Электростатические взаимодействия в водном окружении	325
Заряды в неоднородной среде.....	327
Заряды в корпускулярной среде.....	330
Измерение электрических полей в белках при помощи белковой инженерии.....	333
Дополнительные замечания.....	335
Б. Водородные связи	339
Водородные связи белковой цепи в водном окружении.....	344
В. Дисульфидные и координационные связи	349
Г. Гидрофобные взаимодействия	353
Элементы термодинамики.....	353
Гидрофобность: феноменология.....	355
Физический смысл гидрофобного эффекта.....	359
Доступная воде поверхность молекул и их гидрофобность.....	362
Д. Ван-дер-ваальсовы взаимодействия: отталкивание и притяжение атомов	369
Е. Конформационные превращения: термодинамика и статистическая физика	375
Не-фазовые и фазовые переходы.....	380
Ж. Конформационные превращения: кинетика	385
З. «Свободный пробег» и диффузия	391
И. Теория переходов «спираль—клубок» в гомополимерах	395
К. Модель случайных энергий	399
«Энергетическая щель» в модели случайных энергий.....	401
Л. Теория переходов «глобула—клубок» в гомополимерах	405
М. Математический аппарат статистической физики одномерных систем и динамическое программирование	411
Одномерные системы: статистическая физика и поиск энерге- тического минимума.....	411
Динамическое программирование и поиск оптимального вы- равнивания последовательностей.....	415
Предметный указатель	417