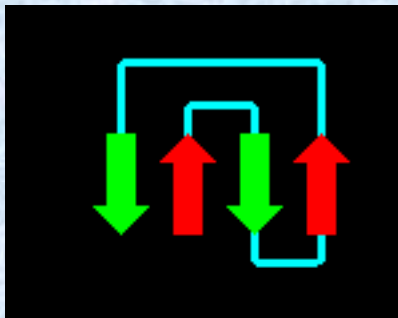


**Δομικές επικράτειες Τάξης β
(β -επικράτειες)**

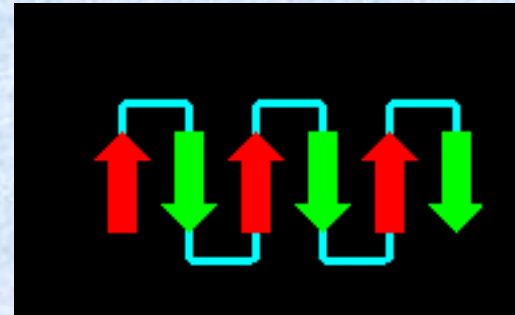
Βασικές τοπολογίες β-μοτίβων

Η δομή των δομικών επικρατειών τάξης β κυριαρχείται από μοτίβα β-κλώνων σε διάφορες τοπολογίες. Οι β-κλώνοι είναι στην πλειοψηφία των περιπτώσεων **αντιπαράλληλοι**. Αν και τα θεωρητικώς δυνατά β-μοτίβα είναι πάμπολλα, στην φύση παρατηρείται ένα ελάχιστο μέρος αυτών. Τα βασικότερα (πιο συχνά) είναι:

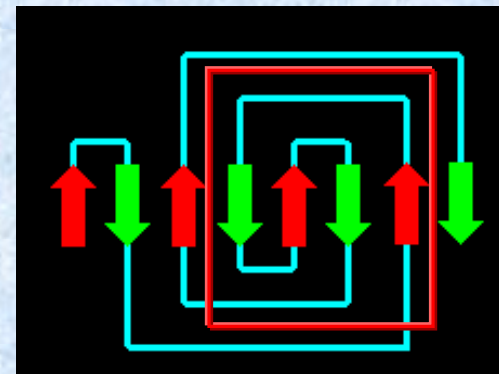


Greek key

β-μαϊάνδρος



Jelly roll



Μοτίβα αναδίπλωσης

Τα μοτίβα αναδίπλωσης (folds) που δημιουργούνται είναι **συνδυασμοί** των προηγούμενων τοπολογιών και κάποιων παραλλαγών τους, παραδείγματα:

β-μαϊάνδρος ή
παράλληλοι κλώνοι

→ Ανοιχτές αντιπαράλληλες
β-επιφάνειες,
→ sandwiches β-επιφανειών
→ β-έλικες

Greek key

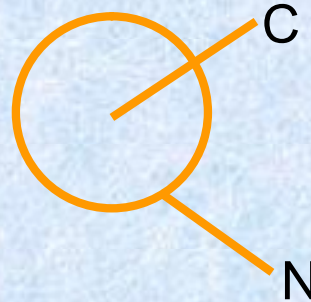
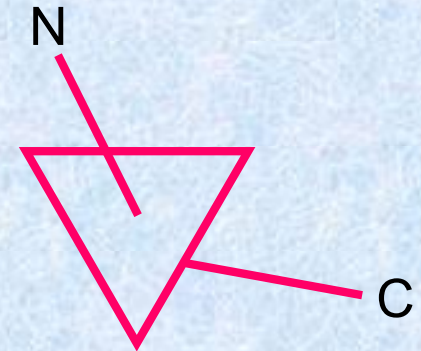
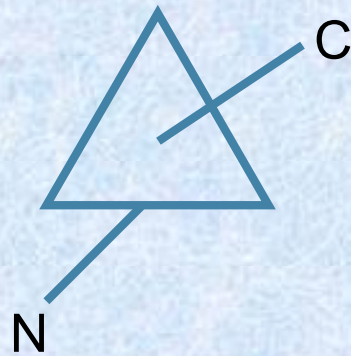
→ Greek key β-βαρέλια

Jelly roll

→ Jelly roll β-βαρέλια

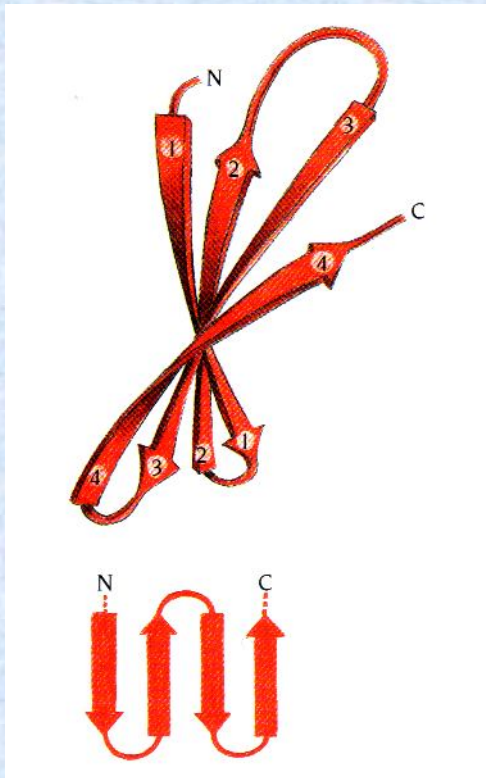
Τοπολογικά διαγράμματα TOPS

www.tops.leeds.ac.uk/



Τοπολογικά διαγράμματα TOPS

Τα τοπολογικά διαγράμματα μας δείχνουν την διασύνδεση των β-κλώνων στον χώρο και την κατεύθυνση τους



Τοπολογικό διάγραμμα TOPS (Topology Of Protein Structure) ενός β-μιαίνδρου

Sandwiches β-επιφανειών

Πολλές δομικές επικράτειες περιέχουν ένα μοτίβο αναδίπλωσης στο οποίο δύο β-πτυχωτές επιφάνειες πακετάρονται η μία απέναντι από την άλλη σαν ένα sandwich (ο πρώτος και ο τελευταίος κλώνος δεν αλληλεπιδρούν με υδρογονικούς δεσμούς).

Ο αριθμός των κλώνων είναι συνήθως μικρός λόγω του twist των β-κλώνων. Η αλληλεπίδραση στο κέντρο του sandwich είναι κατά κανόνα **υδρόφοβη**.

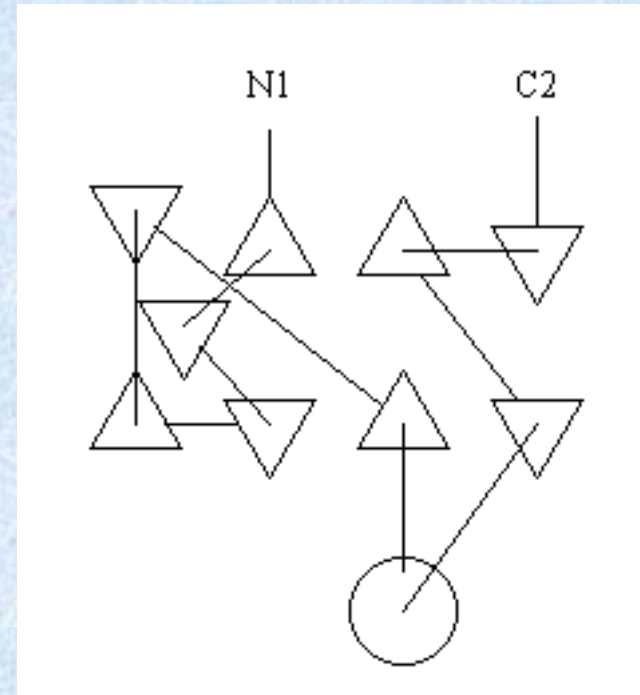
Όταν το twist των δύο β-επιφανειών είναι αρκετά μεγάλο και οι β-κλώνοι πολλοί, το sandwich μοιάζει με **πεπλατισμένο βαρέλι**.

Sandwiches β-επιφανειών

Οι τοπολογίες που εμφανίζουν συχνά τα β-sandwiches είναι:

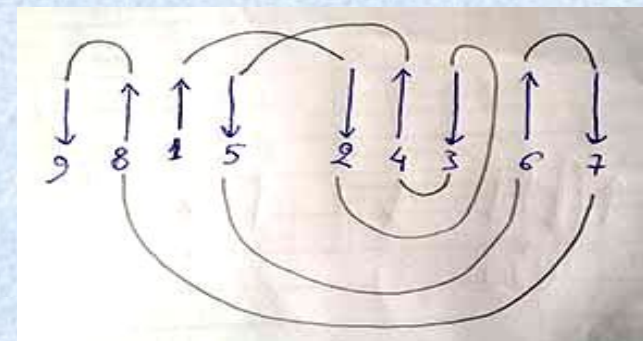
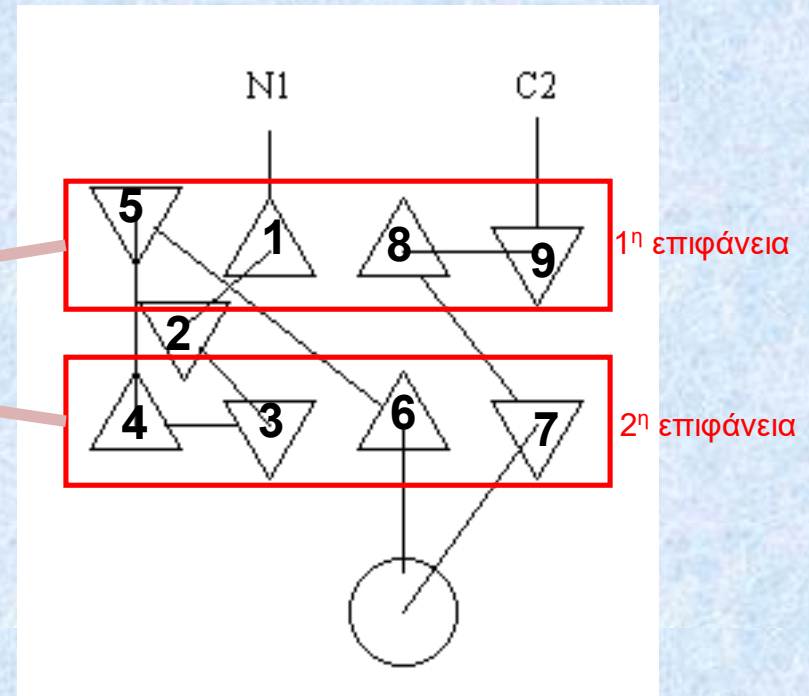
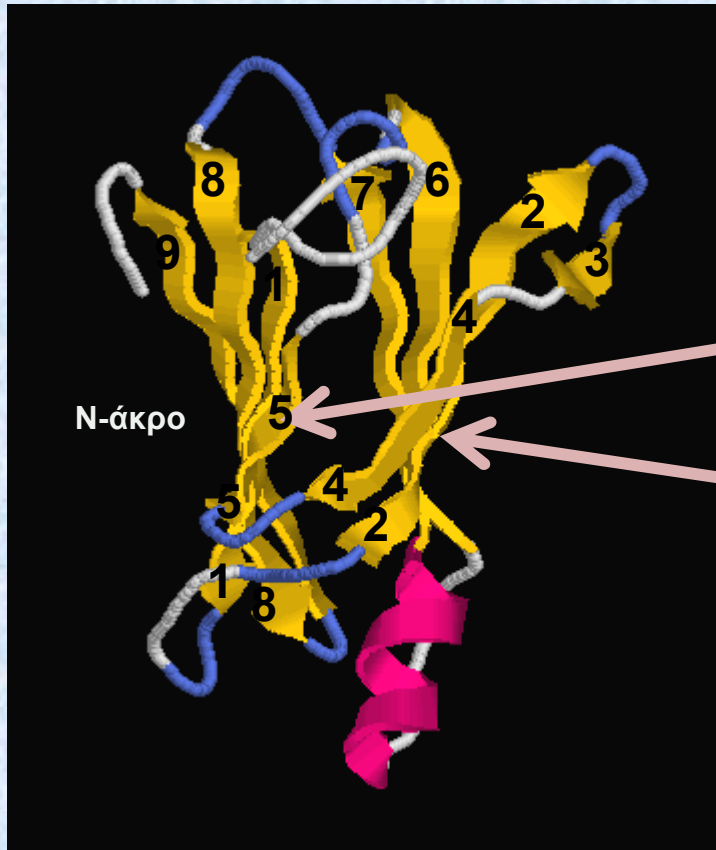
- β-μαϊάνδρος
- Greek key
- Jelly roll

Sandwiches β-επιφανειών

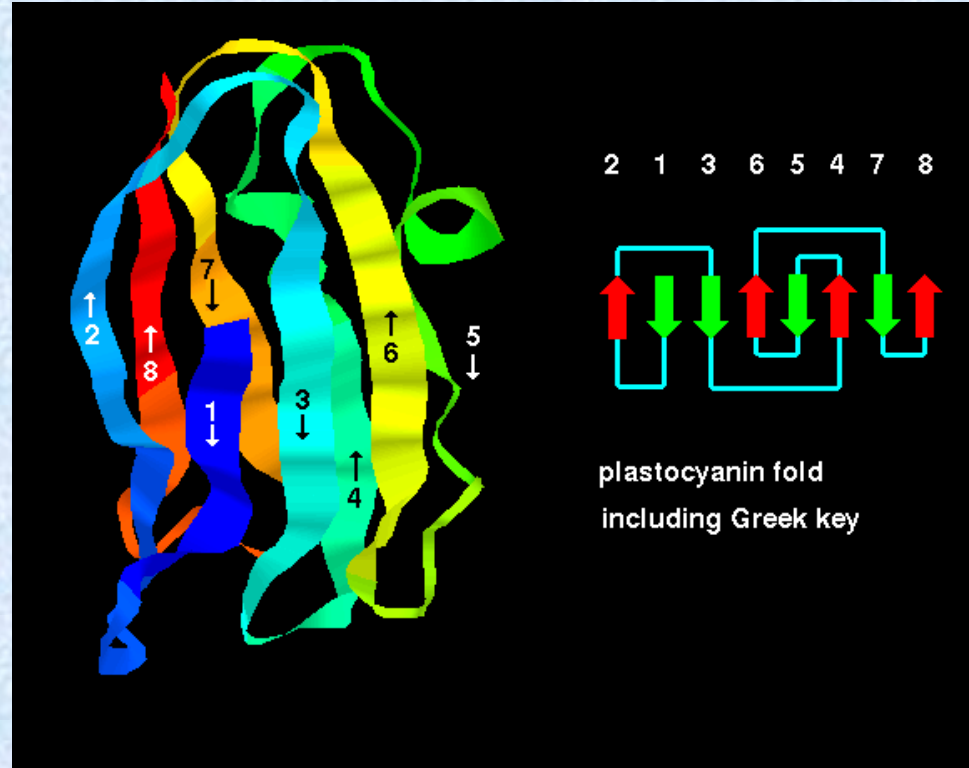


Μία δομική επικράτεια της τρανσθυρετίνης. Η τοπολογία είναι Greek key

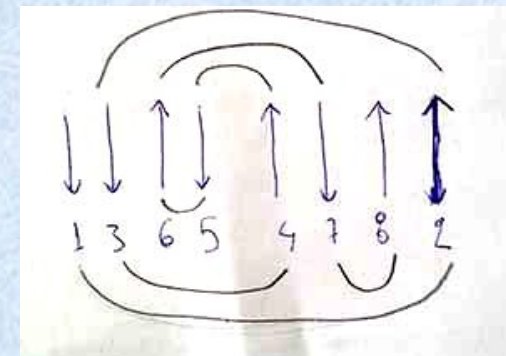
Sandwiches β-επιφανειών



Sandwiches β-επιφανειών



Στη περίπτωση της πλαστοκυανίνης πάλι έχουμε ένα β-sandwich με τοπολογία Greek key



Sandwiches β-επιφανειών



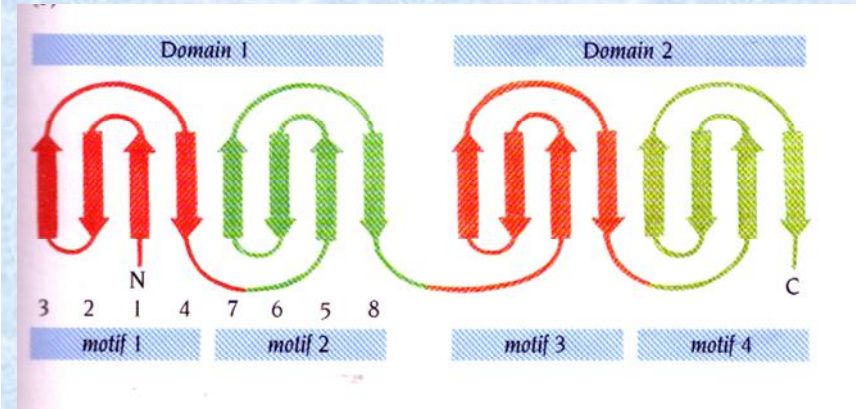
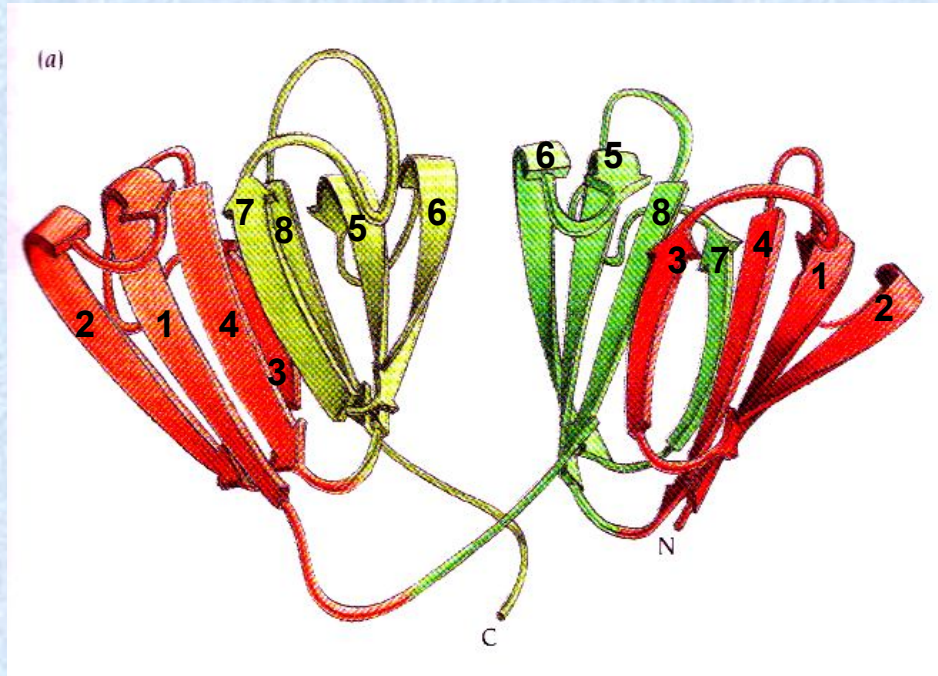
Η γ-κρυσταλλίνη αποτελείται από **δύο δομικές επικράτειες**. Η κάθε μία αναδιπλώνεται σε β-sandwich

Sandwiches β -επιφανειών



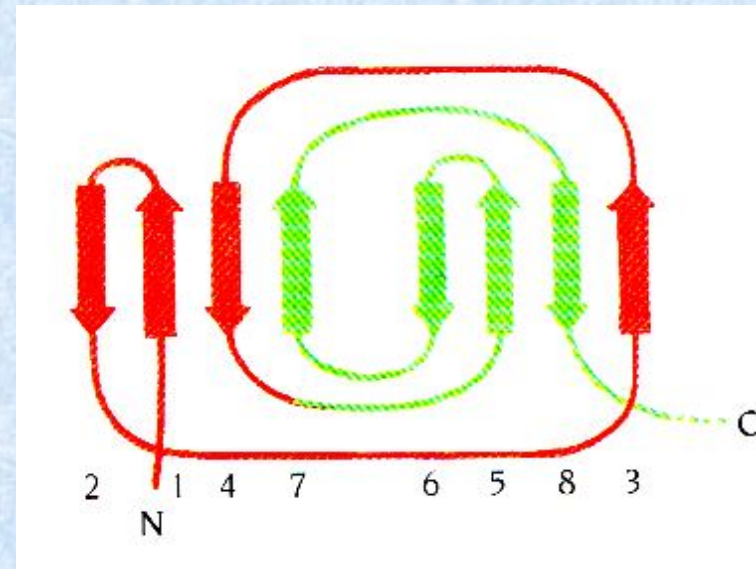
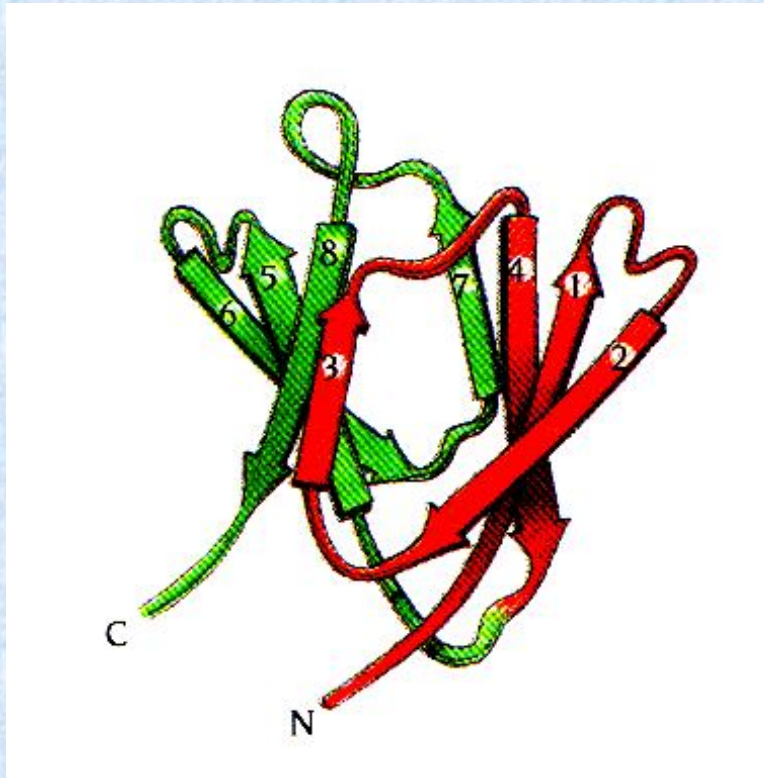
Μια από τις δύο δομικές επικράτειες της γ -κρυσταλλίνης. Εδώ η τοπολογία είναι Greek key, αλλά η ιδιαίτερη τοπολογία της επικράτειας επιδέχεται περαιτέρω μελέτης

Sandwiches β-επιφανειών



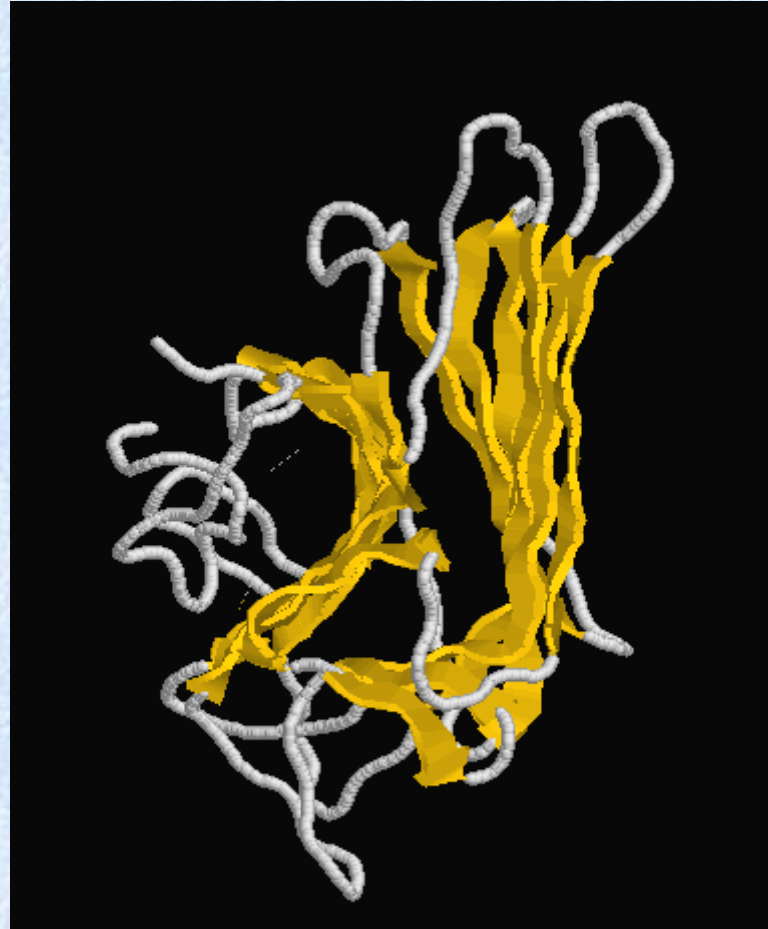
Από το τοπολογικό διάγραμμα της πρωτεΐνης είναι φανερό ότι και οι δύο δομικές επικράτειες έχουν την ίδια τοπολογία η οποία είναι επανάληψη δύο Greek key μοτίβων

Sandwiches β-επιφανειών



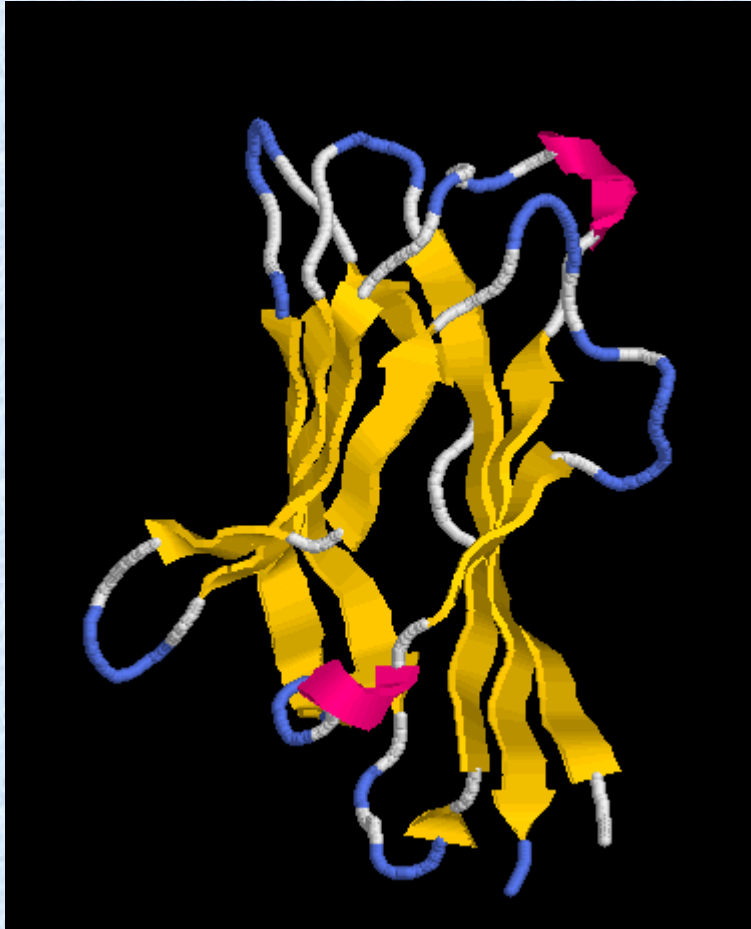
Μια προσεχτική ματιά μας δείχνει ότι το κάθε μοτίβο Greek key μοιράζεται ανάμεσα στις δύο β-επιφάνειες. Το πρώτο σχηματίζεται από τους β-κλώνους 1, 2, 3 και 4 και το δεύτερο από τους κλώνους 5, 6, 7 και 8.

Sandwiches β-επιφανειών



Το sandwich β-επιφανειών της κονκαναβαλίνης A

Sandwiches β-επιφανειών



Τοπολογία Jelly roll

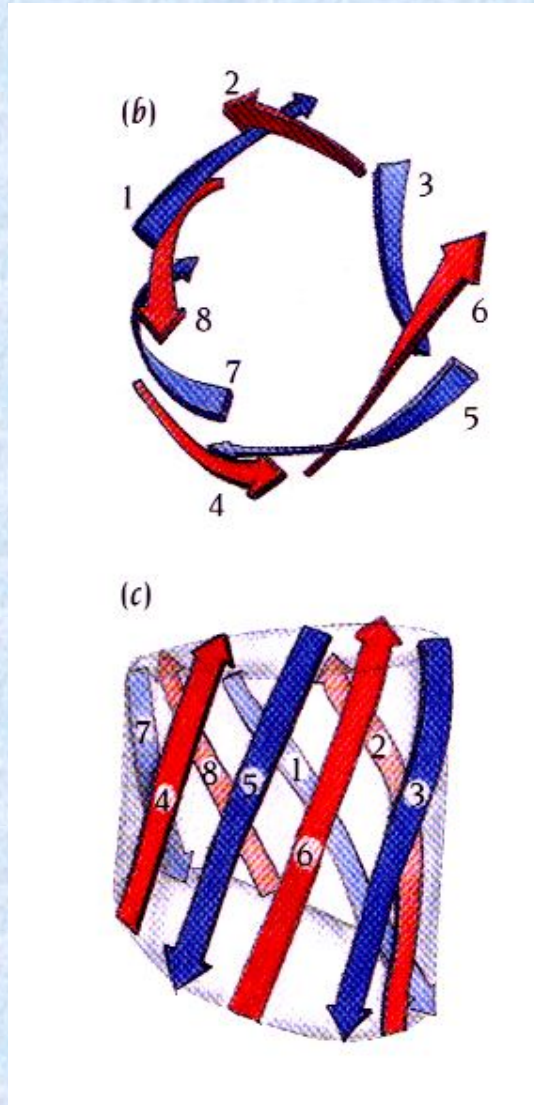
Το β-sandwich της γλυκοσυλο-ασπαραγινάσης

Sandwiches β-επιφανειών



Το β-sandwich της λιποκαλίνης σχηματίζει ένα παραμορφωμένο, «ανοιχτό» β-βαρέλι χρησιμοποιώντας έναν σχεδόν συνεχόμενο β-μαίανδρο.

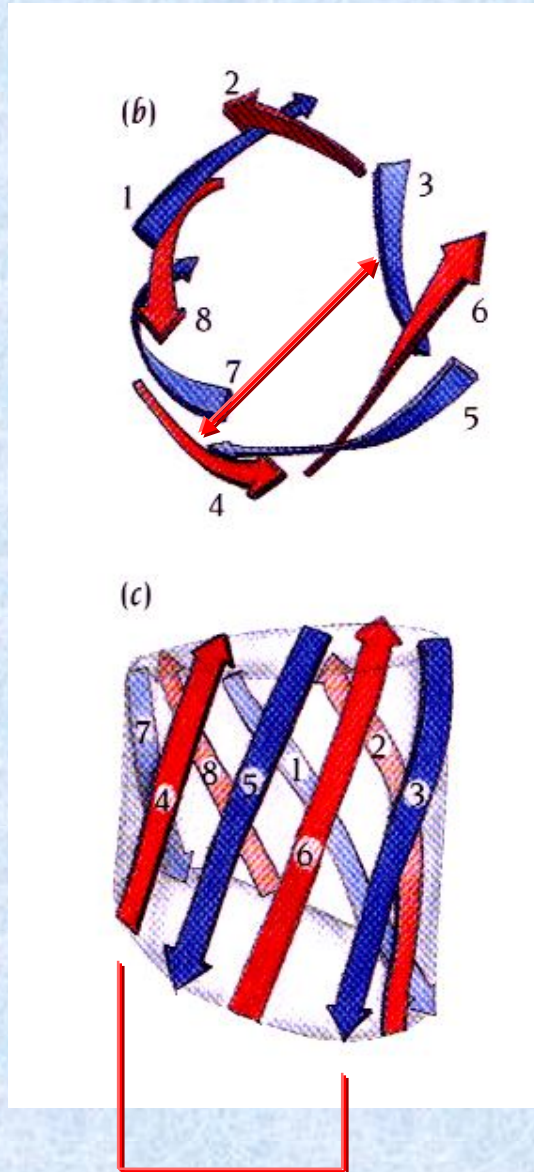
Αντιπαράλληλα β-βαρέλια



Το μοτίβο αναδίπλωσης στο οποίο β-κλώνοι διευθετούνται με τους άξονες τους σχεδόν παράλληλους και με τέτοιο τρόπο που να σχηματίζεται μια κλειστή β-πτυχωτή επιφάνεια ονομάζεται **β-βαρέλι**.

Όταν οι β-κλώνοι είναι αντιπαράλληλοι τότε έχουμε τα λεγόμενα **αντιπαράλληλα β-βαρέλια** (up-and-down β-barrels).

Αντιπαράλληλα β-βαρέλια



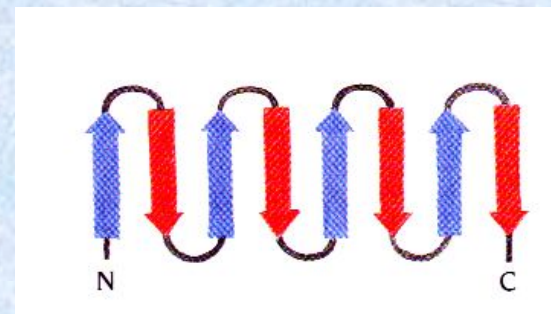
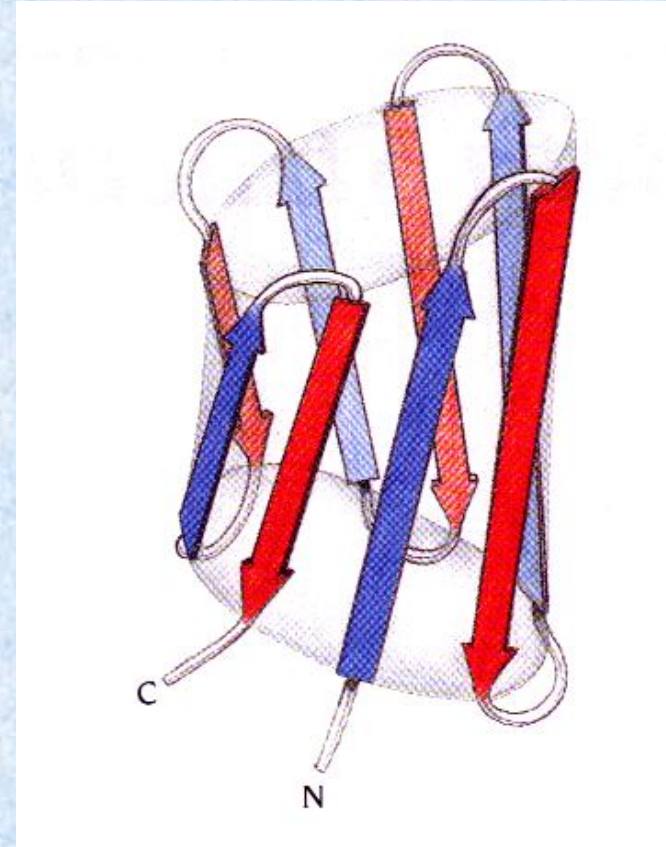
Όπως φαίνεται στο σχήμα, διαδοχικοί β-κλώνοι στην ακολουθία δεν είναι απαραίτητο να είναι διαδοχικά τοποθετημένοι στην επιφάνεια του β-βαρελιού.

Τα β-βαρέλια σταθεροποιούνται με υδρόφοβες αλληλεπιδράσεις στο εσωτερικό τους.

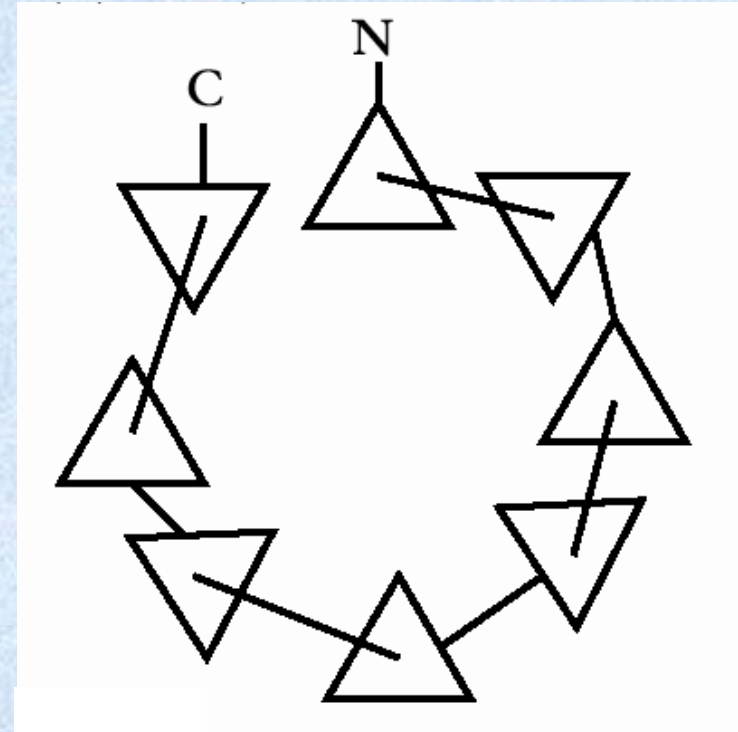
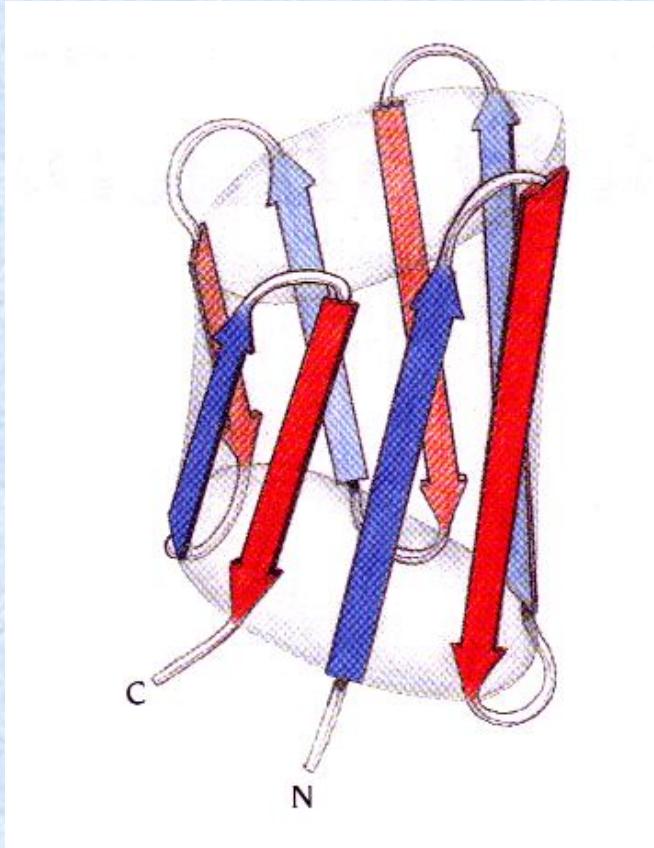
Αντιπαράλληλα β-βαρέλια

Η πιο απλή τοπολογία β-κλώνων σε ένα αντιπαράλληλο β-βαρέλι είναι ο β-μαϊάνδρος.

Σ' αυτή την περίπτωση, όλοι οι κλώνοι είναι αντιπαράλληλοι και κάθε κλώνος συνδέεται διαδοχικά με τον γειτονικό του με μία φουρκέτα.

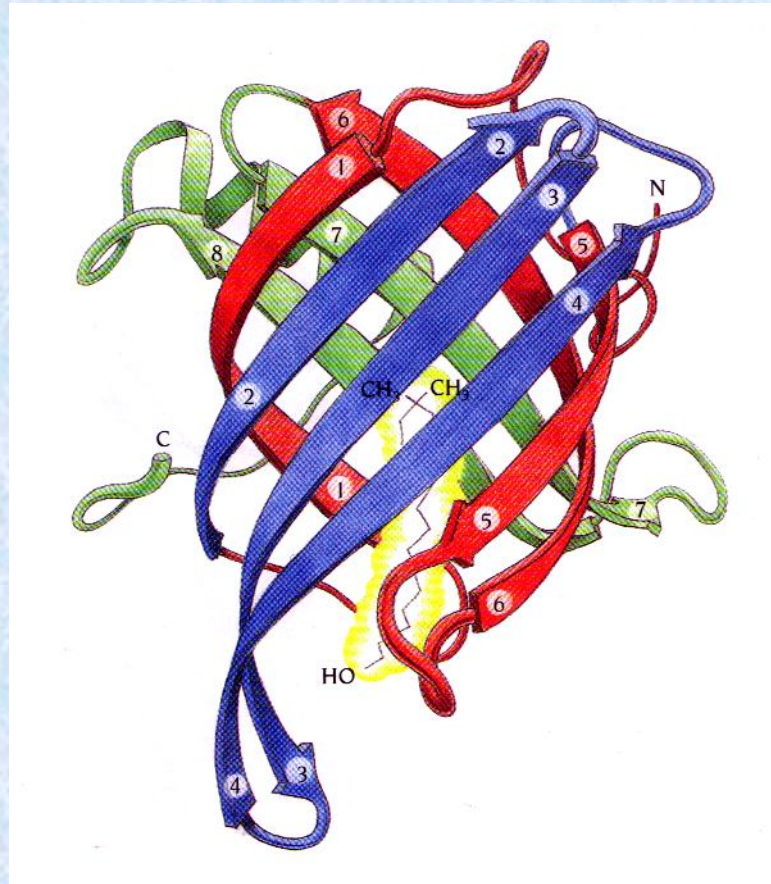


Αντιπαράλληλα β-βαρέλια



Διάγραμμα TOPS αντιπαράλληλου β-βαρελιού οκτώ β-κλώνων με τοπολογία β-μαιάνδρου

Αντιπαράλληλα β-βαρέλια



Ένα παράδειγμα είναι η δομή της μεταφοράσης της ρετινόλης (βιταμίνη A)

Αντιπαράλληλα β-βαρέλια

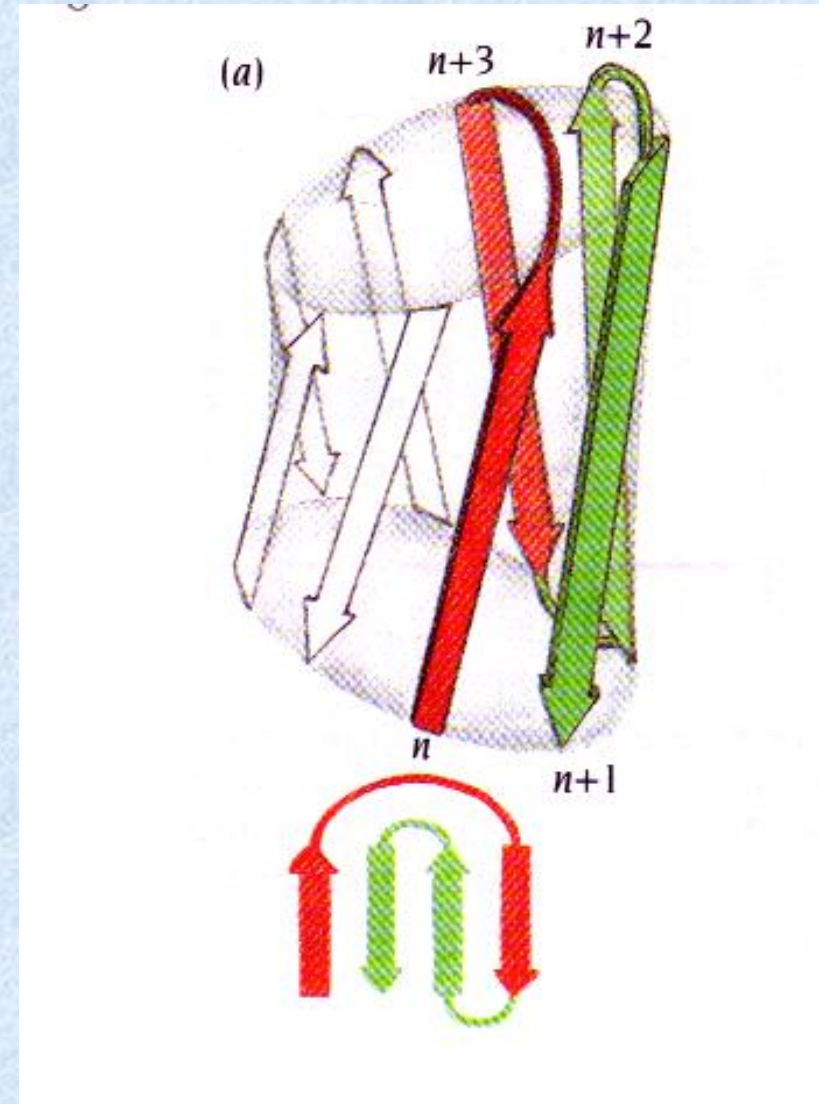
Η επόμενη τοπολογία που εμφανίζεται συχνά στα β-βαρέλια είναι η τοπολογία Greek key.

Πώς όμως θα μπορούσε να φτιαχτεί ένα β-βαρέλι, ασπύμε με οκτώ β-κλώνους, με τοπολογία Greek key;

Αντιπαράλληλα β-βαρέλια

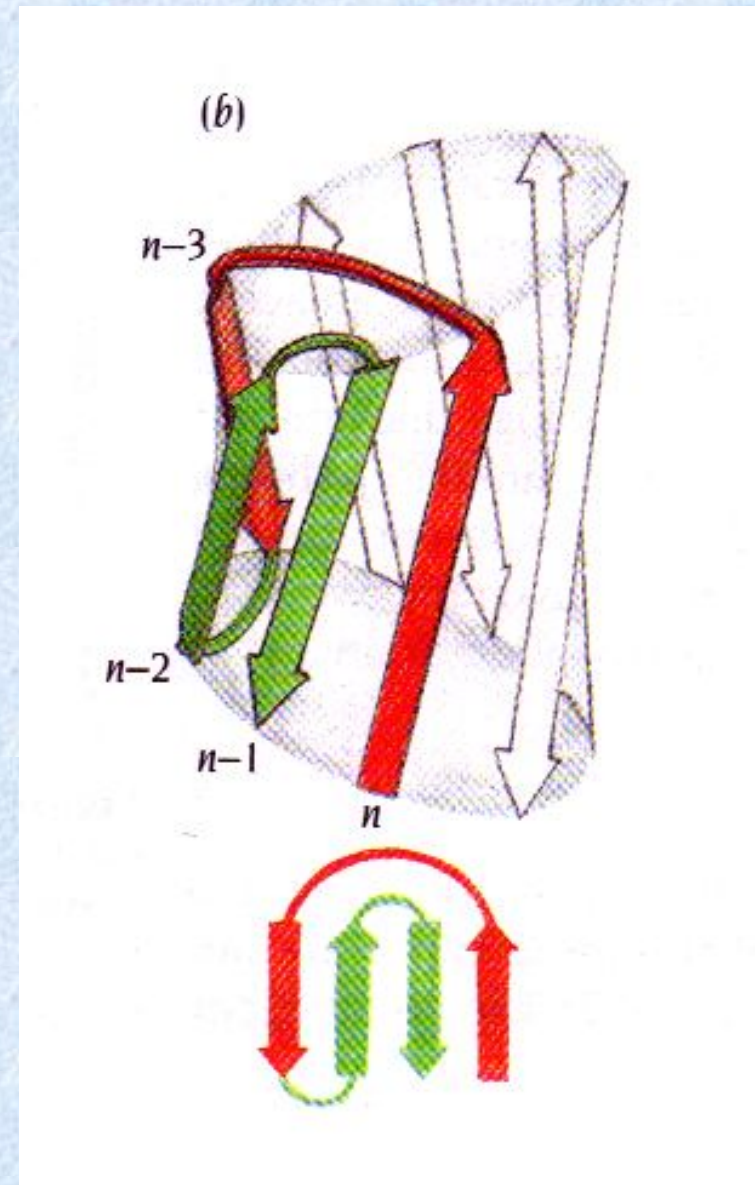
Αν ξεκινήσουμε από ένα β-κλώνο n και θέλουμε να κάνουμε συνδέσεις στην ίδια πλευρά του βαρελιού, τότε δεν μπορούμε να συνδέσουμε τον κλώνο αυτό με τον $n+1$ διότι έτσι θα δημιουργούσαμε σύνδεση β-μαϊάνδρου.

Μία επιλογή είναι σύνδεση με τον κλώνο $n+3$

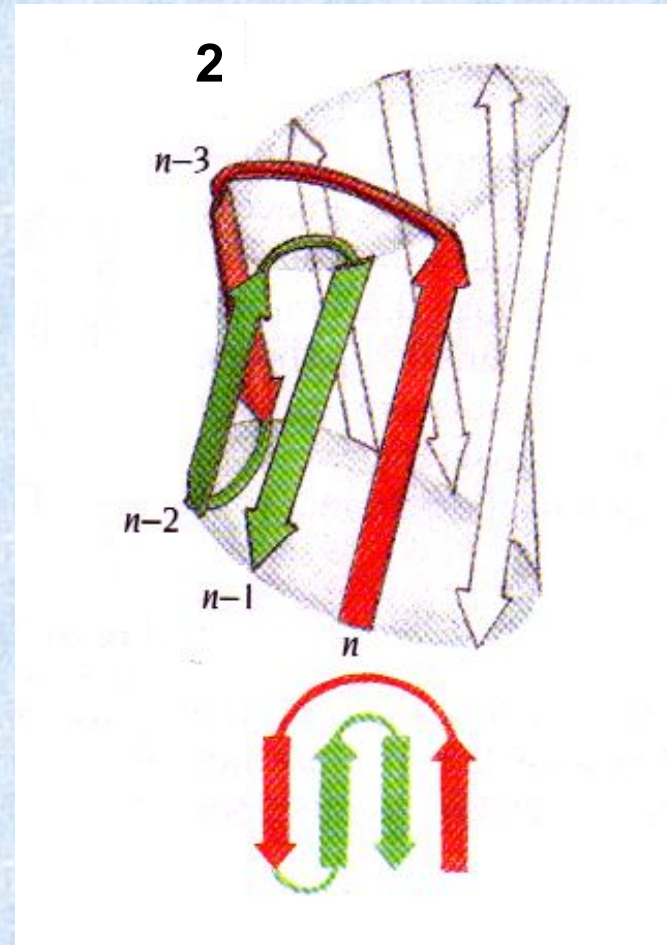
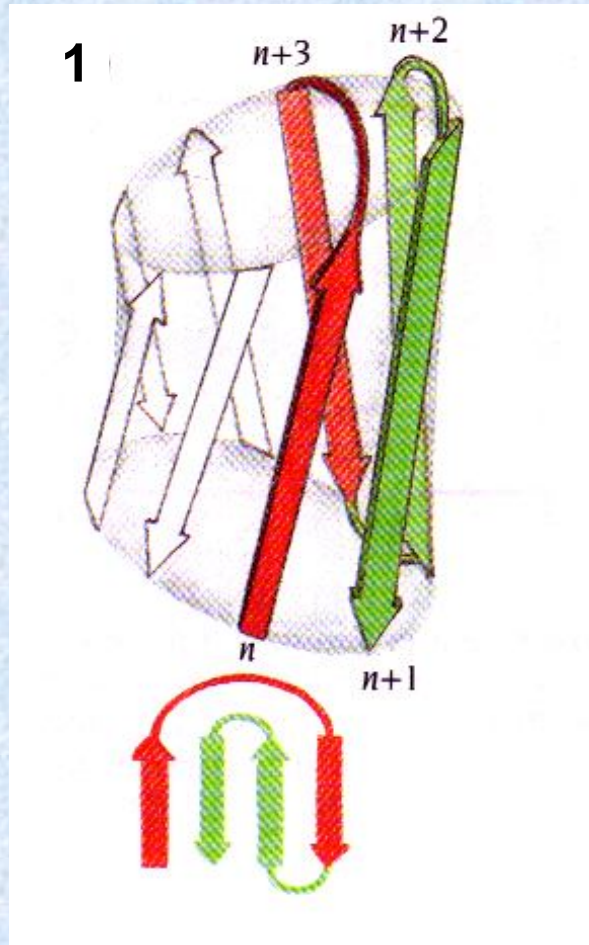


Αντιπαράλληλα β-βαρέλια

Η δεύτερη, και τελευταία, επιλογή είναι σύνδεση με τον κλώνο $n-3$.

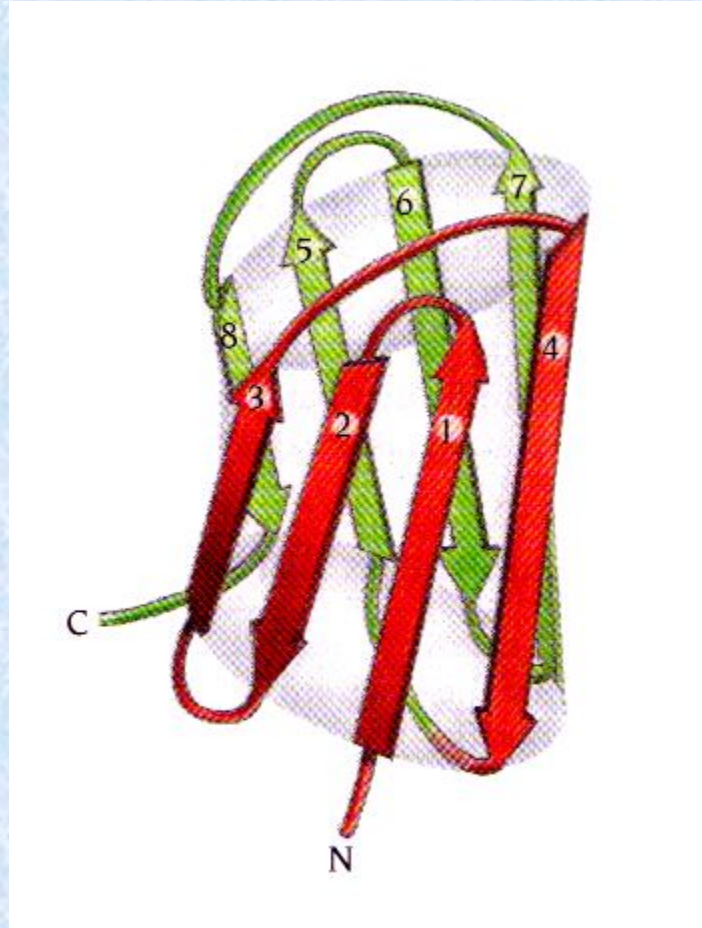


Αντιπαράλληλα β-βαρέλια



Η δεύτερη περίπτωση είναι το «κατοπτρικό είδωλο» της πρώτης.
Στις πρωτεΐνες παρατηρείται **μόνο** η πρώτη τοπολογία.

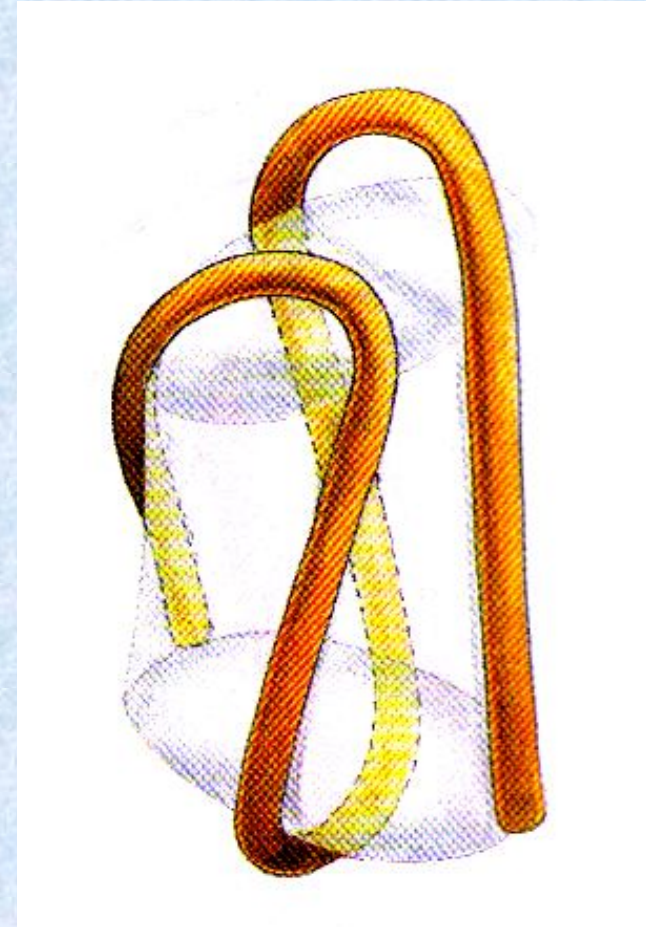
Αντιπαράλληλα β-βαρέλια



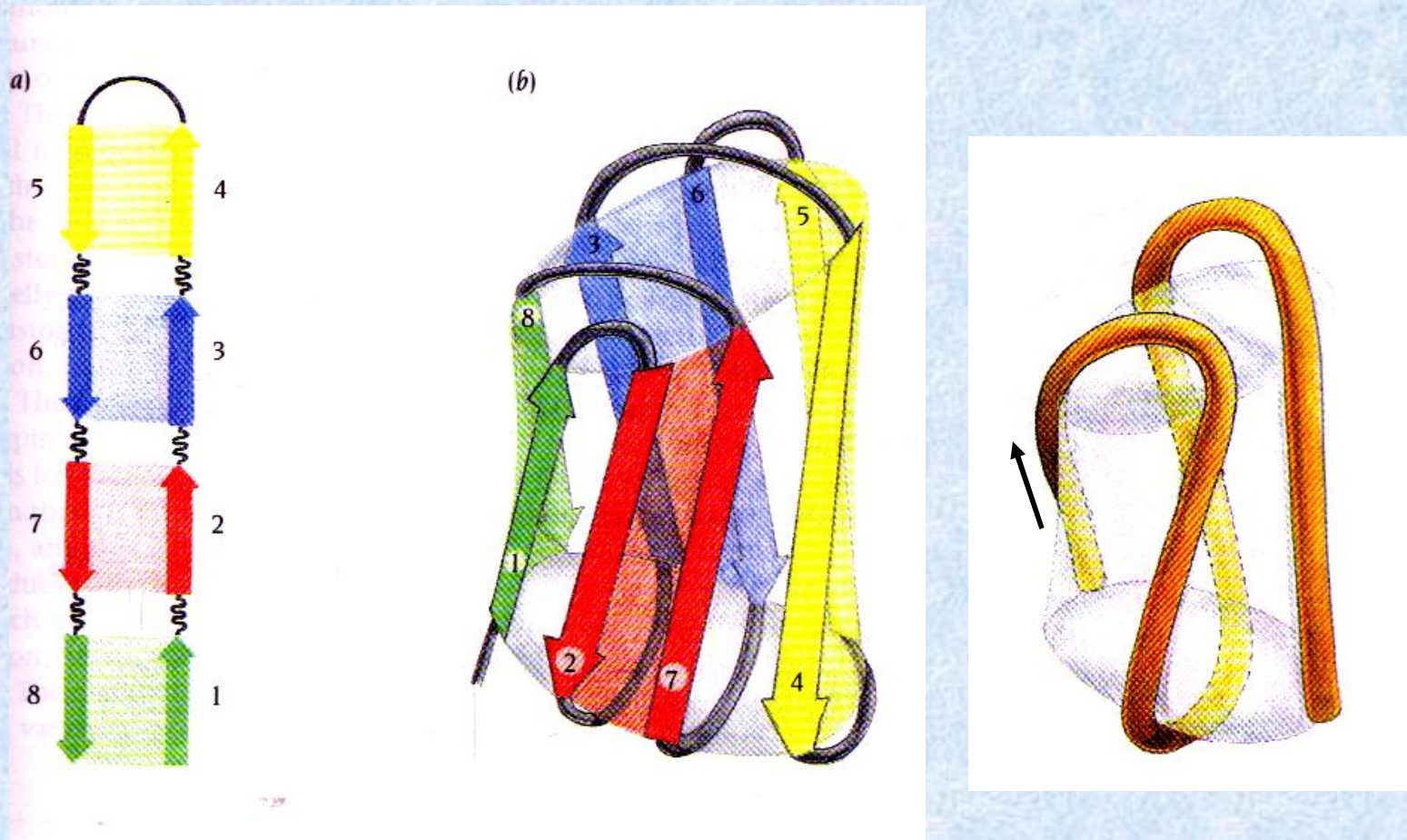
Ένα β-βαρέλι με δύο μοτίβα Greek key

Jelly roll β-βαρέλια

Αν οι συνδέσεις είναι αντιδιαμετρικές και στις δύο πλευρές του β-βαρελιού δημιουργείται ένα συχνά παρατηρούμενο μοτίβο αναδίπλωσης που ονομάζεται **Jelly roll** (ΗΠΑ) ή **Swiss roll** (Ευρώπη)

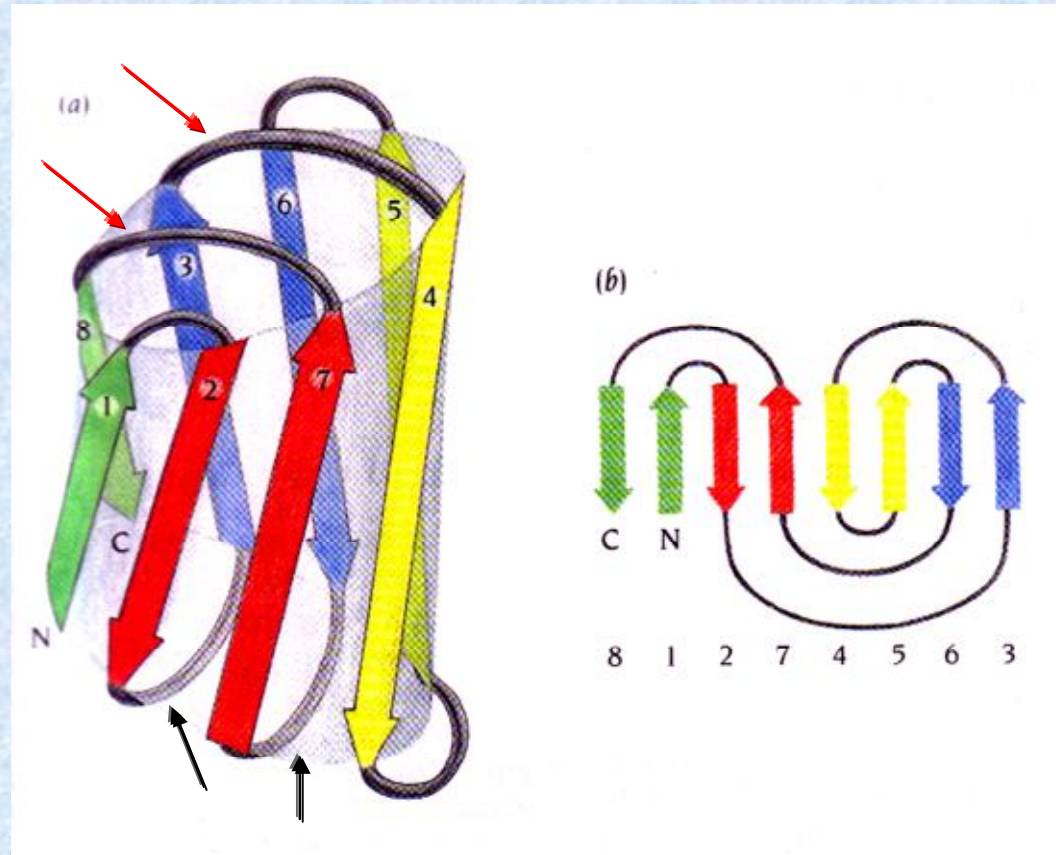


Jelly roll β -βαρέλια



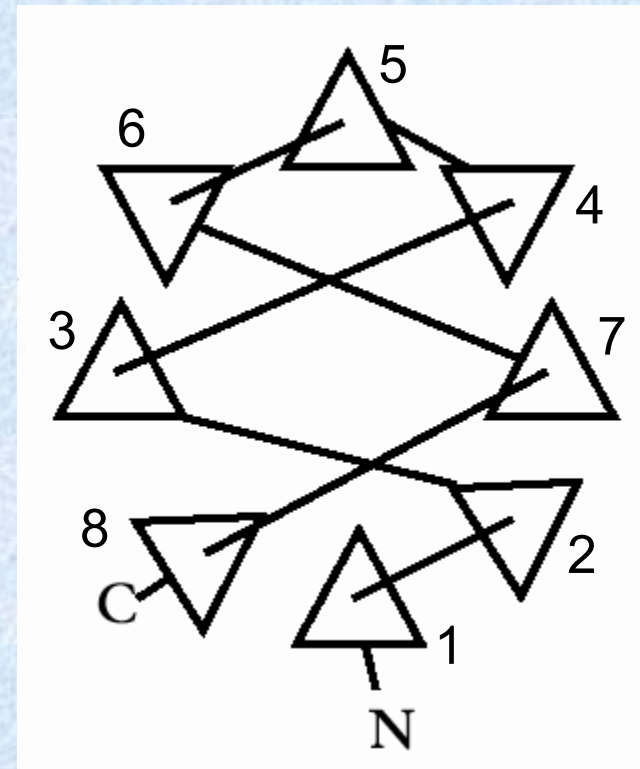
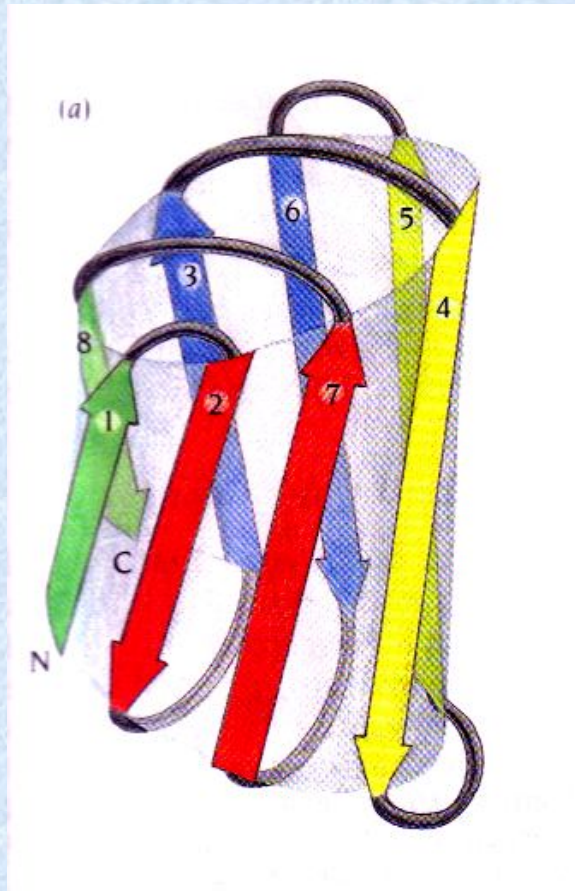
Μπορούμε να φανταστούμε το μοτίβο Jelly roll σαν την αναδίπλωση μιας μακριάς β -φουρκέτας (αριστερά) σε ένα β -βαρέλι ακολουθώντας τη φορά που δείχνεται στην δεξιά εικόνα

Jelly roll β-βαρέλια



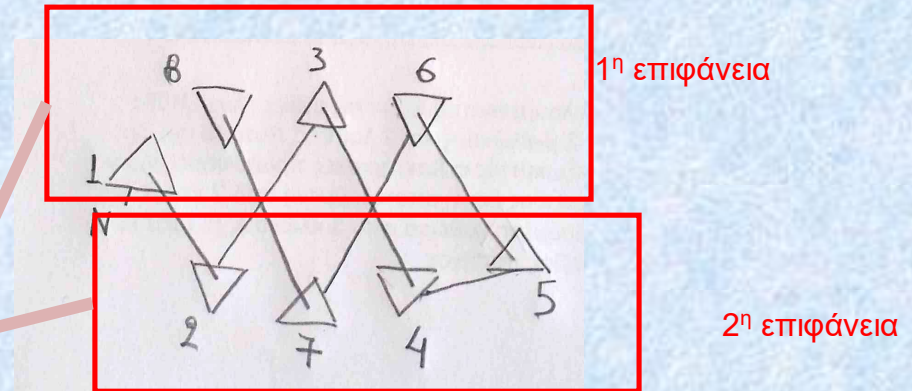
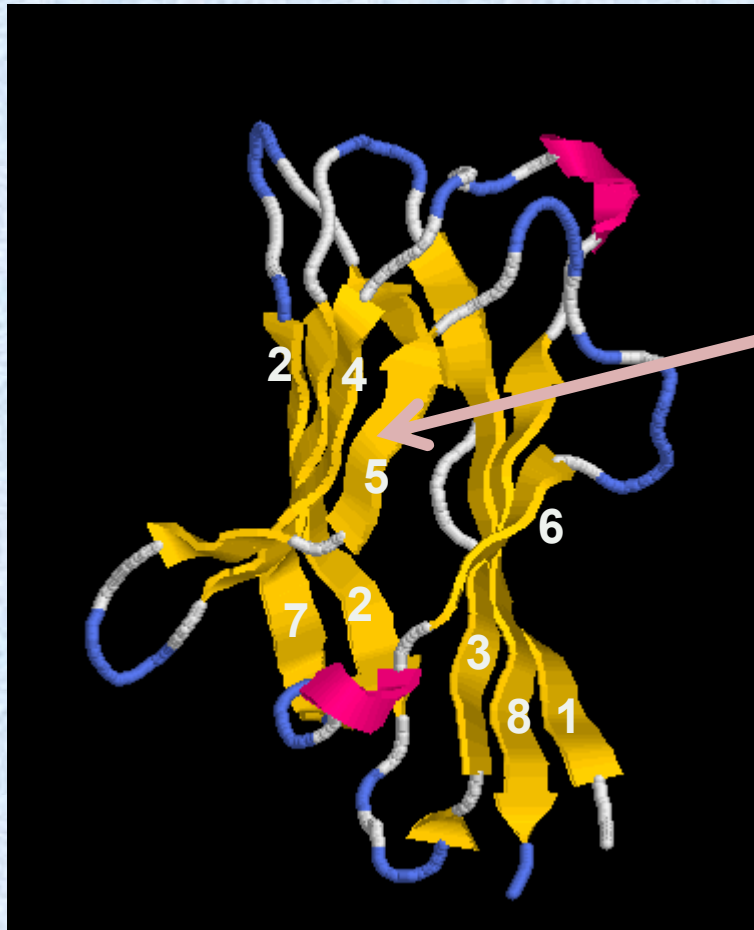
Στα Jelly roll βαρέλια με οκτώ κλώνους υπάρχουν δύο αντιδιαμετρικές συνδέσεις στην πάνω και κάτω πλευρά του βαρελιού, αντίστοιχα. Το ίδιο μοτίβο μπορεί να δημιουργηθεί και με λιγότερους ($n > 4$) ή περισσότερους κλώνους. Όπως βλέπετε (δεξιά) το μοτίβο Jelly roll εμπεριέχει τοπολογίες Greek key.

Jelly roll β -βαρέλια

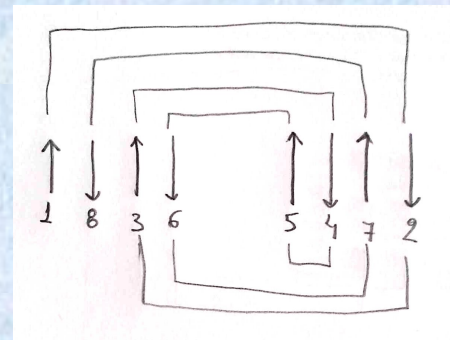


Διάγραμμα TOPS αντιπαράλληλου Jelly roll β -βαρελιού οκτώ β -κλώνων

Sandwiches β-επιφανειών



Τοπολογία Jelly roll



Το β-sandwich της γλυκοσυλο-ασπαραγινάσης

Jelly roll β -βαρέλια



Jelly roll β -βαρέλι.
Παράγοντας επιμήκυνσης Tu (Ef-Tu)

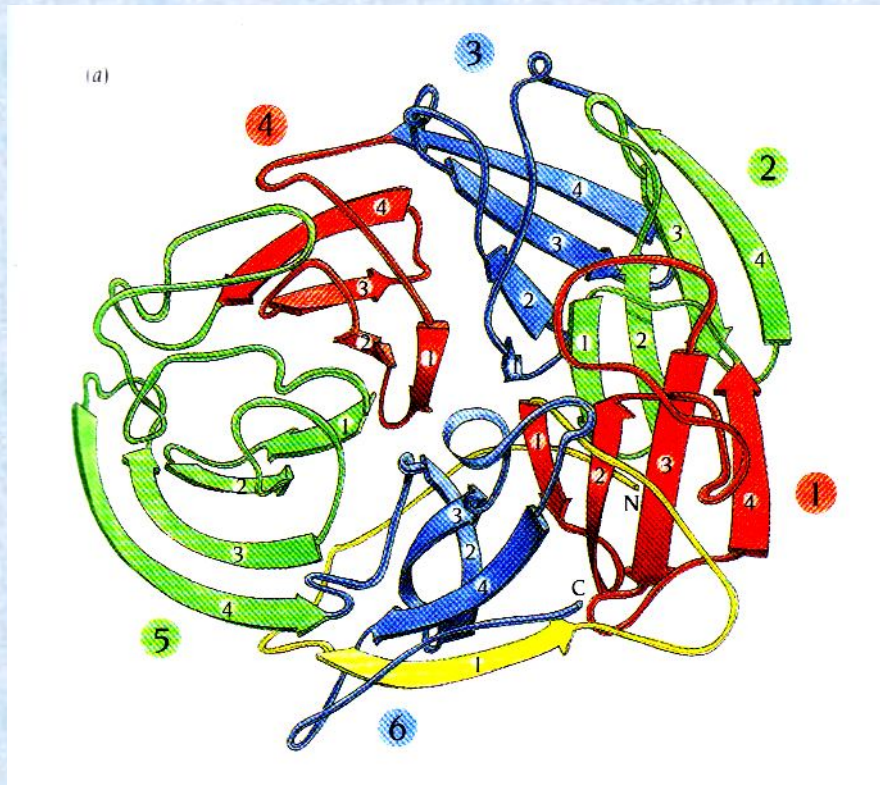
Jelly roll β -βαρέλια



Άλλο ένα jelly roll β -βαρέλι.
Επικράτεια από το ένζυμο πυροσταφυλική κινάση

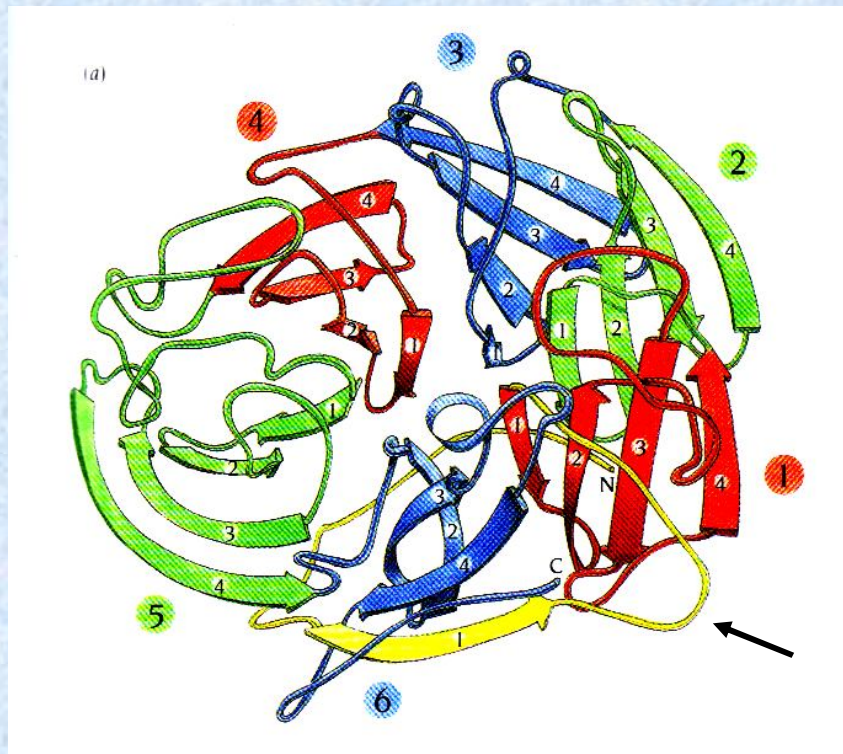
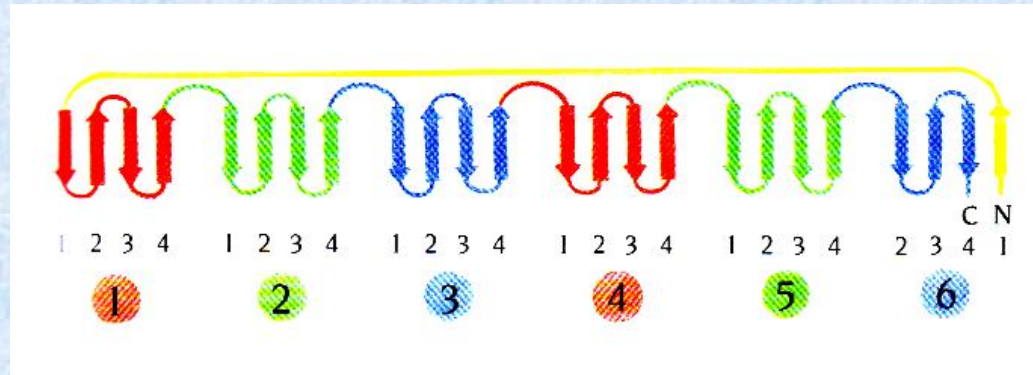
β-προπέλες

Η δομή β-προπέλα σχηματίζεται από τέσσερις ή περισσότερες ανοικτές β-επιφάνειες που πακετάρονται στον χώρο σαν μια προπέλα



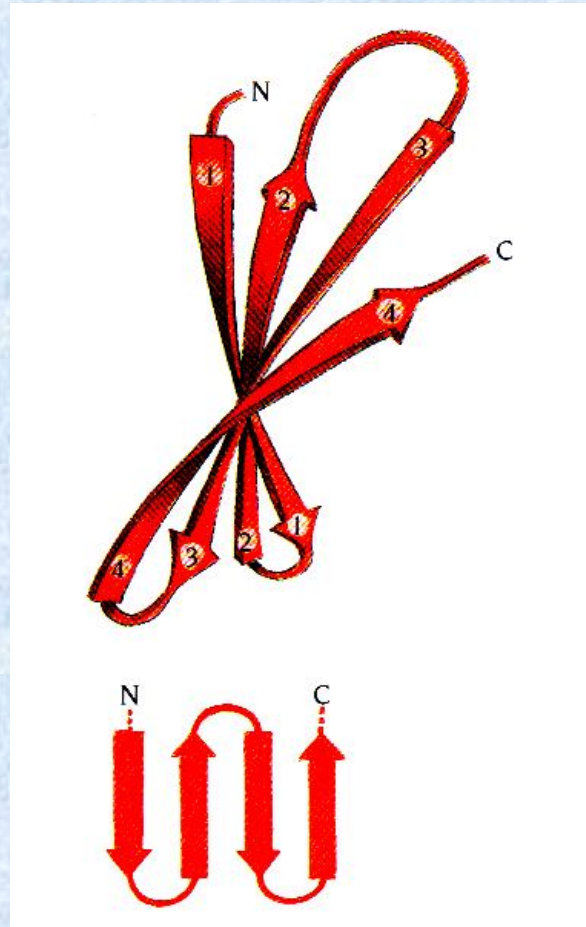
Π.χ. η δομή μιας από τις τέσσερις υπομονάδες της νευραμινιδάσης του ιού της γρίπης σχηματίζεται από έξι διαδοχικές ανοικτές β-επιφάνειες που η κάθε μία αποτελεί το «πτερύγιο» μιας προπέλας

β-προπέλες



Το τοπολογικό διάγραμμα μας δείχνει ότι η σύνδεση διαδοχικών «πτερυγίων» γίνεται μεταξύ του κλώνου 4 μιας επιφάνειας και του κλώνου 1 της επόμενης. Ο βρόχος που ενώνει το N-άκρο με τον πρώτο κλώνο του μοτίβου αριθμός 1 έχει συγκρίσιμο μήκος με τους υπόλοιπους, αντίθετα από το τι φαίνεται στο διάγραμμα.

β-προπέλες

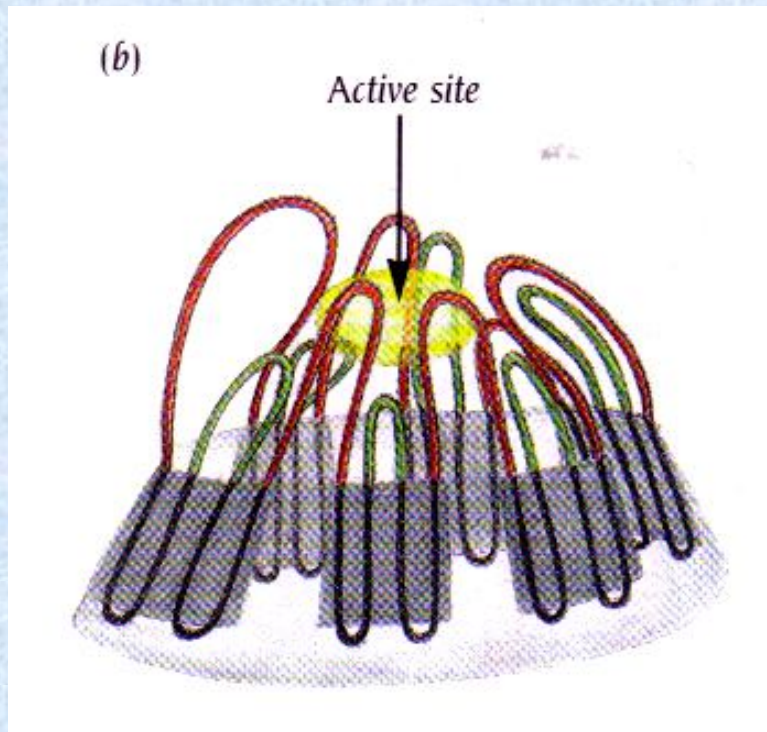


Το «πτερύγιο» της β-προπέλας είναι ένας β-μαϊάνδρος τεσσάρων αντιπαράλληλων β-κλώνων. Το twist των κλώνων είναι τόσο μεγάλο που ο πρώτος και τελευταίος κλώνος είναι σχεδόν κάθετοι μεταξύ τους.



Διάγραμμα TOPS

β-προπέλες



Το ενεργό κέντρο σε δομές β-προπέλας βρίσκεται στο κέντρο της προπέλας και σχηματίζεται από τους βρόχους που ενώνουν τα «πτερύγια».

Σε συνδυασμό με τους βρόχους που ενώνουν τους κλώνους στον επαναλαμβανόμενο β-μαϊάνδρο σχηματίζεται ένα φαρδύ «χωνί»

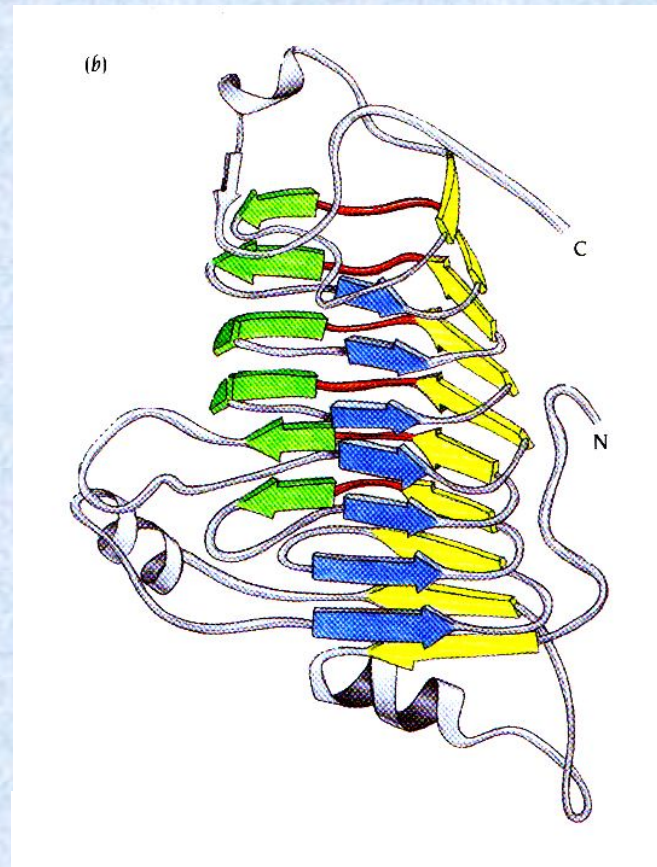
β-προπέλες



Η β-προπέλα της σιαλιδάσης

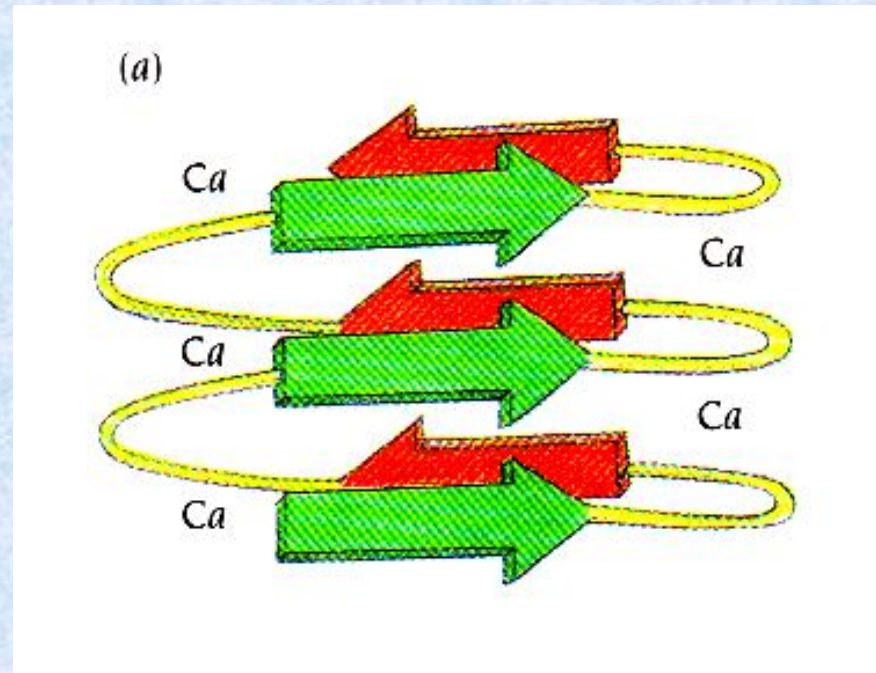
β-έλικες

Το 1993 η ομάδα του **Frances Journak** λύνοντας τη δομή της πηκτικής λυάσης (pectate lyase) ανακάλυψε ένα καινούργιο μοτίβο αναδίπλωσης, τη β-έλικα.

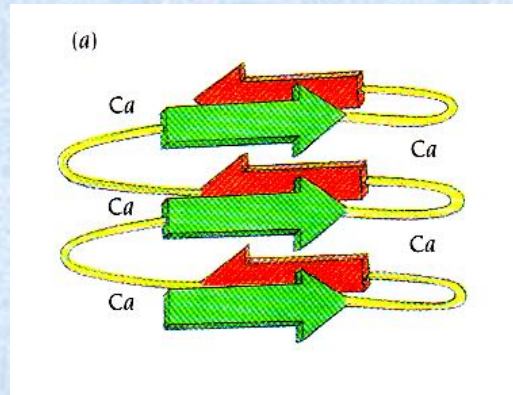


β-έλικες

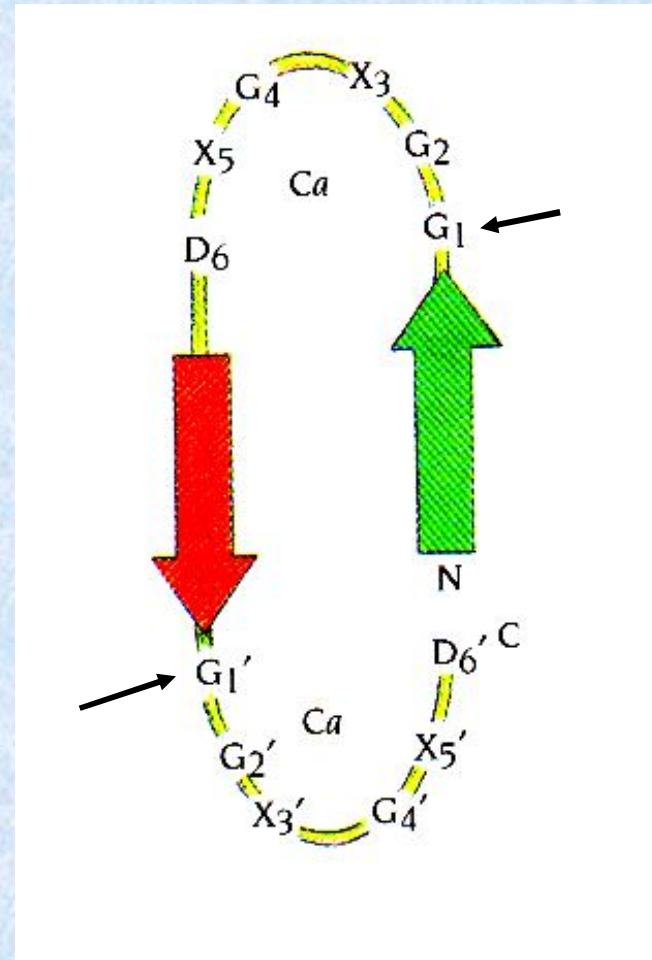
Η απλούστερη β-έλικα σχηματίζεται από την ελικοειδή σπείρωση δύο παράλληλων β-κλώνων ενωμένων με λούπες.



β-έλικες

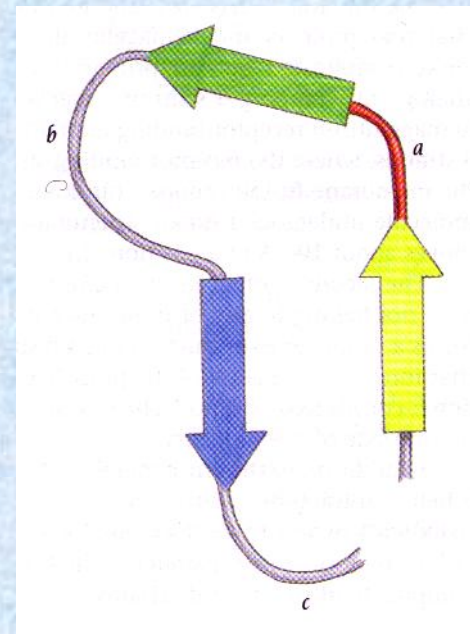
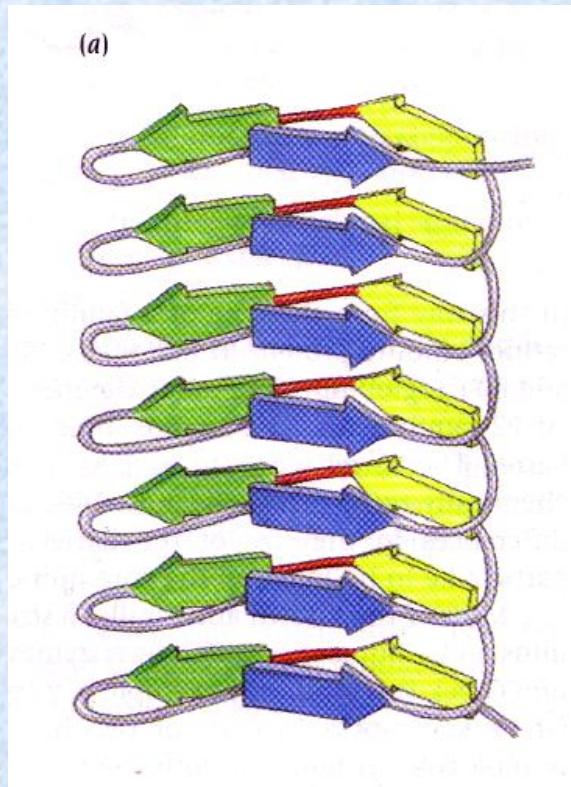


Η βασική επαναλαμβανόμενη μονάδα σε αυτό το μοτίβο αναδίπλωσης (δεξιά) αποτελείται από 18 κατάλοιπα, τα οποία έχουν δις την γενική ακολουθία **Gly-Gly-X-Gly-X-Asp-X-U-X**, όπου X είναι οποιοδήποτε κατάλοιπο και U ένα υδρόφοβο κατάλοιπο (συχνά Leu). Οι λούπες σταθεροποιούνται με ιόντα ασβεστίου

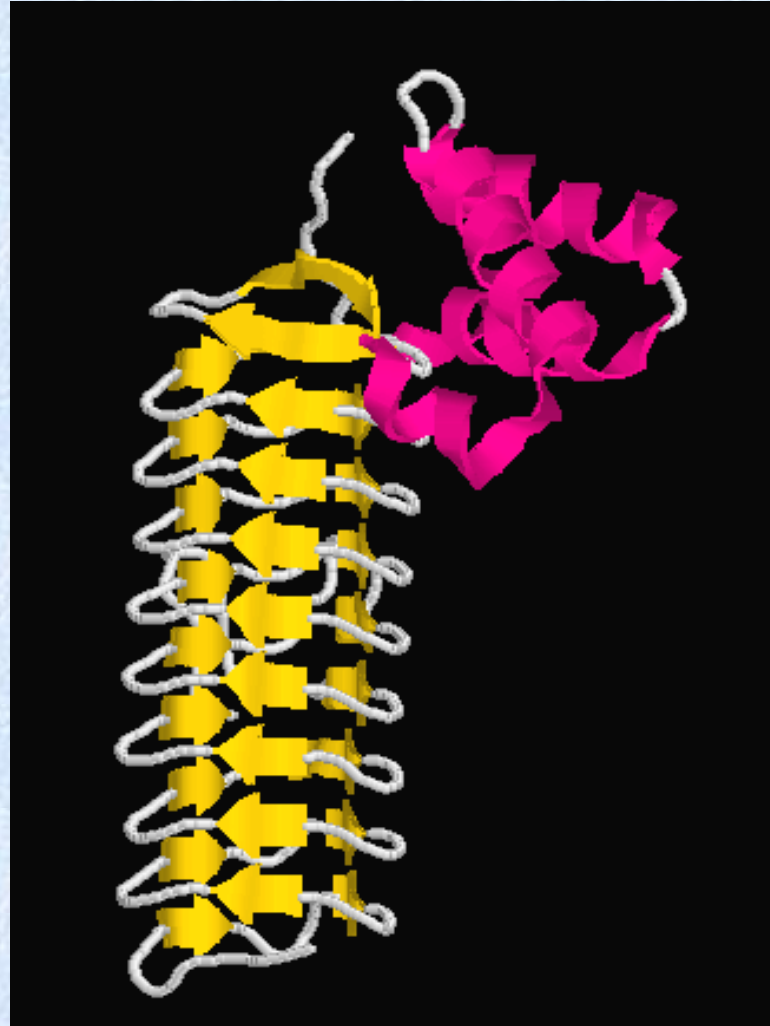


β-έλικες

Στην περίπτωση της πηκτικής λύασης το επαναλαμβανόμενο μοτίβο σχηματίζεται από τρεις β-κλώνους. Η επανάληψη του μοτίβου σχηματίζει μια σχεδόν τριγωνική β-έλικα, που αποτελείται από τρεις παράλληλες β-επιφάνειες



β-έλικες



Ακετυλο-γλουκοζάμινο ακυλ-τρανσφεράση

β-τριφύλλι (β-trefoil)



Το β-τριφύλλι είναι ένα μοτίβο αναδίπλωσης όπου ένα β-βαρέλι παραμορφώνεται σε μορφή τριφυλλιού

Αναστολέας της τρυψίνης