

5P21

Jordi Villà-Freixa

{{ page.title }}

Anàlisi de les relacions seqüència-estructura-funció del canal iònic de potassi (PDB: 1BL8)

- Estructura secundària guai
- Estructura supersecundària
- Plegament
- Funció

El codi PDB:1BL8 correspon a l'estructura de la proteïna KcsA d'*Streptomyces lividans*, codi UNIPROT:P0A334, amb una gran conservació de seqüència pel que es pot veure a l'alineament que el propi PDB ens dona.

La seqüència de la proteïna al PDB és

```
>1BL8_1|Chains A, B, C, D|PROTEIN (POTASSIUM CHANNEL PROTEIN)|Streptomyces lividans (1916)  
ALHWRAAGAATVLLVIVLLAGSYLAVLAERGAPGAQLITYPRALWWSVETATTVGYGDLYPVTLWGRCVAVVVMVAGITSFGLVTAALATW
```

Pots visualitzar la proteïna en aquesta finestra proveïda per Mol*:

Estructura secundària

Es veu com la proteïna és un homotetràmer, format per unitats que contenen dues hèlix alfa transmembrana unides per una alfa hèlix més curta en el porus extern

La següent figura mostra la seqüència de la proteïna i les regions amb hèlix alfa (groc):

Si examinem el fitxer PDB, observem que es repeteix l'estructura de tres hèlix alfa (TM1, hèlix del porus i TM2; tipus 1 seguint la nomenclatura del fitxer PDB) a cadascuna de les quatre cadenes:

HELIX	1	1	ARG A	27	GLU A	51	1	25
HELIX	2	2	TYR A	62	THR A	74	1	13
HELIX	3	3	LEU A	86	THR A	112	1	27

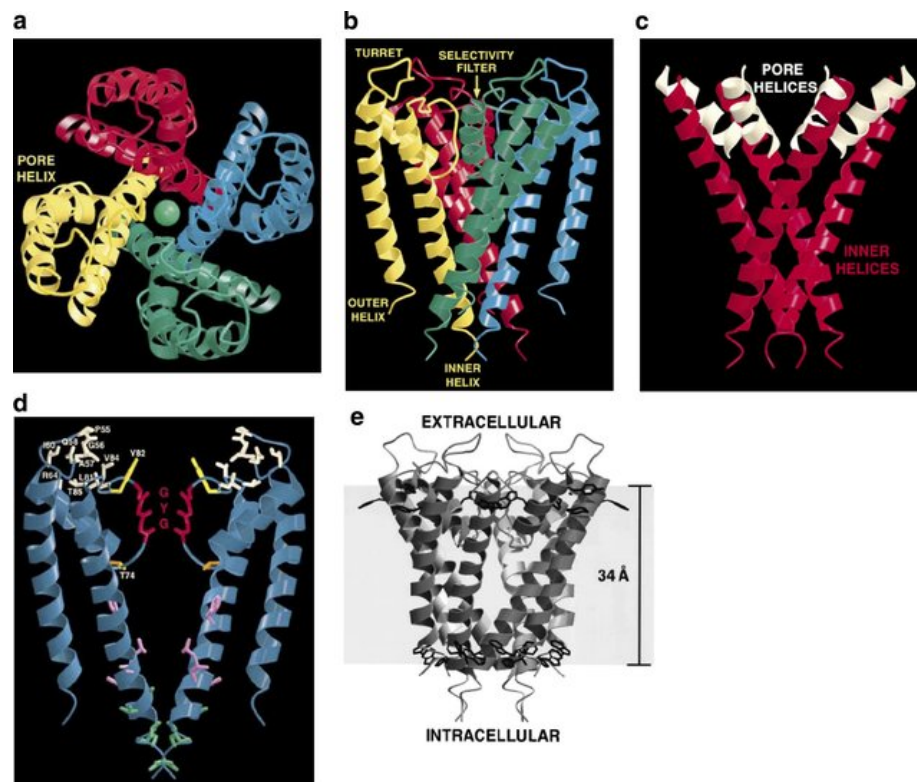


Figure 1: Resum de l'estructura del canal KcsA (Martinac et al. 2008)

```

1bl8 (#0) chain D 23 ALHWRAAGAATVLLVIVLLAGSYLAVLAERGAPGAQLITYPRALWWSVET
1bl8 (#0) chain D 73 ATTVGYGDLYPVTLWGRCVAVVVMVAGITSFGLVTAALATWFGREQ

```

Figure 2: Seqüència de la proteïna mostrant els elements d'estructura secundària

Estructura supersecundària

La figura mostra l'estructura amb un codi de colors progressiu que permet identificar la regió N-terminal (blau) i la regió C-terminal (vermell).

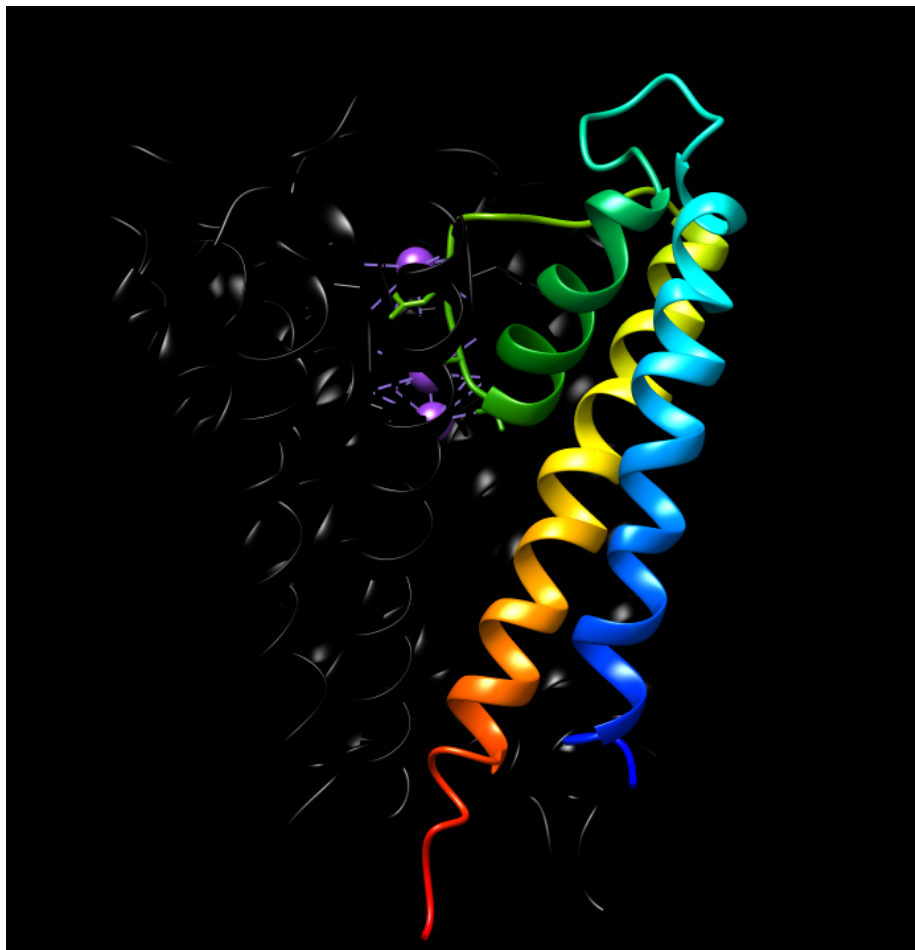


Figure 3: Imatge d'una de les quatre cadenes idèntiques de la proteïna amb la representació amb colors de fred (blau, N-terminal) a calent (vermell, C-terminal) en funció de la seqüència

es poden apreciar els loops que uneixen les hèlix α , i en especial el loop entre l'hèlix del porus i la TM2, que conté els residus responsables del filtre de selectivitat del canal de potassi (ions potassi mostrats en color lila).

Plegament

Es tracta d'una proteïna all α , amb un plegament característic dels canals de potassi controlats per voltatge, quin representant és PDB:2P7T segons la classificació a SCOP

i de domini *helix hairpins* segons CATH.

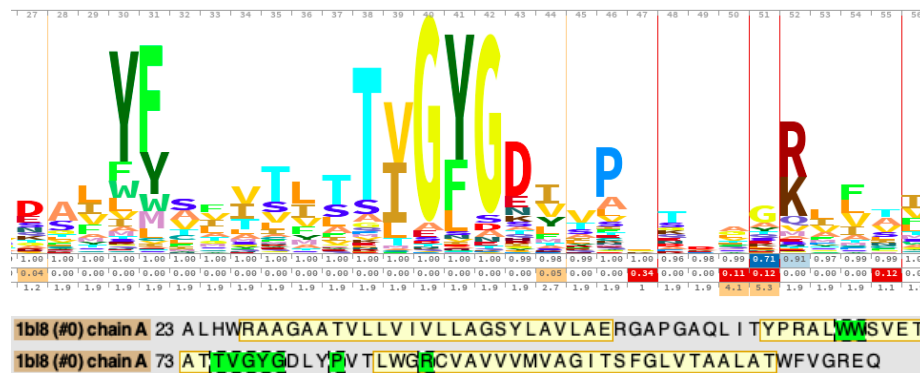
Funció

Podem començar per cercar a PFAM el codi uniprot de la proteïna. Veiem que es tracta d'una proteïna amb un sol domini ben caracteritzat:

Source	Domain	Start	End
Pfam	Ion_trans_2	33	116

Podem aleshores explorar l'entrada per a aquest domini específic: PFAM: PF07885, i reconfirmem que es tracta d'un canal de potassi. El domini concret està altament distribuït, trobat en més de 500 arquitectures diferents, vora 6000 espècies

L'estudi del logo HMM ens mostra una forta conservació d'alguns residus clau en la regió 30-52 de l'alineament que s'ha usat per construir aquest logo. :



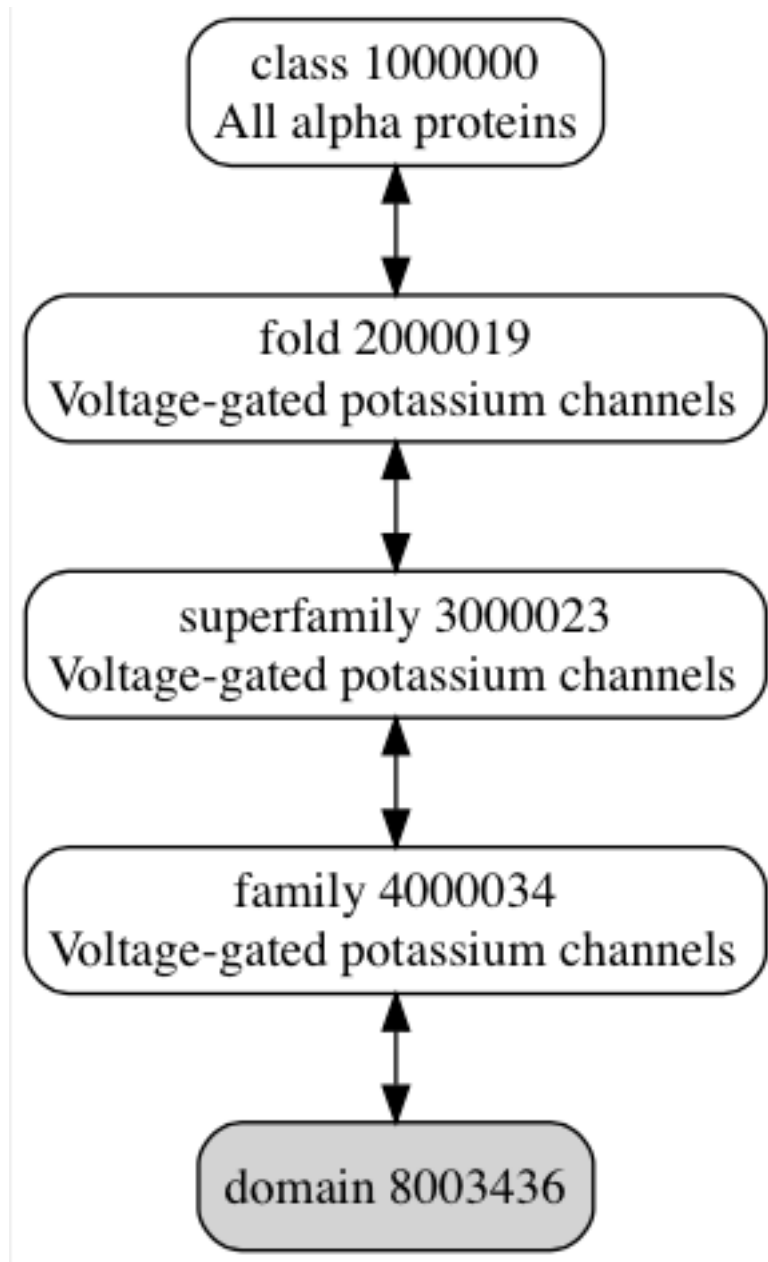


Figure 4: Estructura jeràrquica del domini al qual pertany PDB:1BL8, representada a SCOP per PDB:2P7T

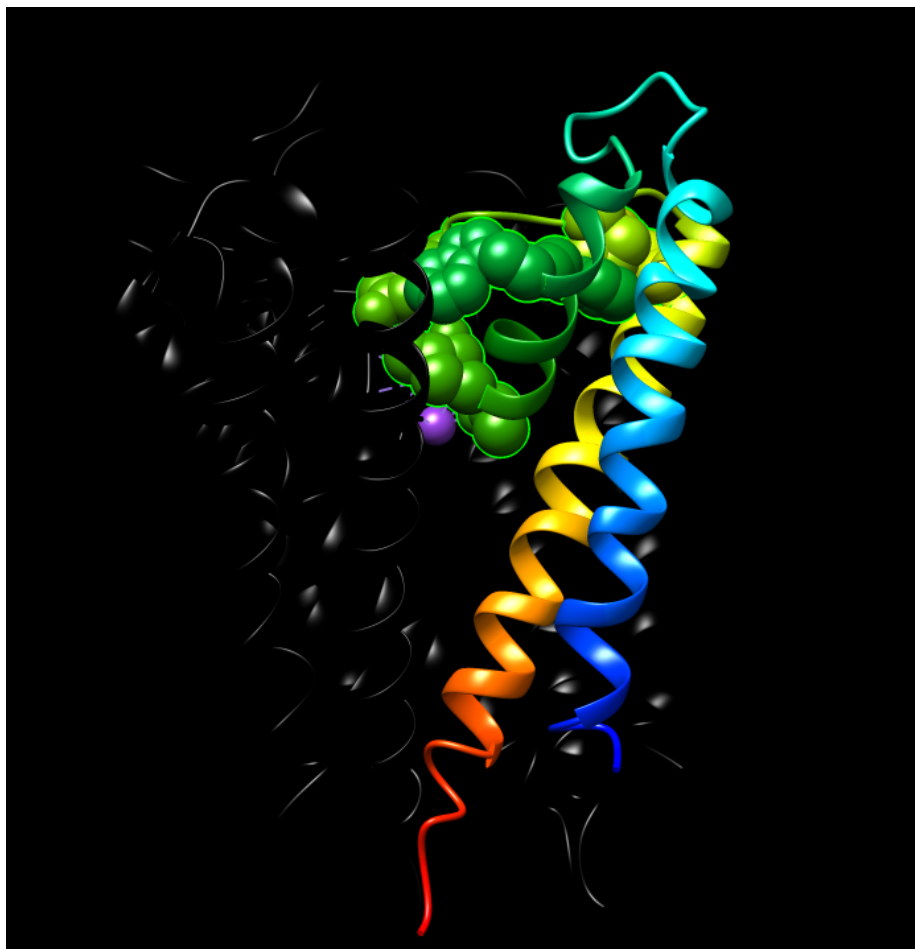


Figure 5: Detall dels residus conservats de la proteïna (representats amb esferes)