

Факультет биоинженерии и биоинформатики

Межфакультетский курс

Лабораторная работа N°1.
Структура биополимеров

Студент: Шутова Ю.М.

1. ПЕПСИН (PEPSIN)

Общий поиск: 1,345 Structures

Выбранная структура: 1PSN

Аннотация:

The three-dimensional crystal structure of human pepsin and that of its complex with pepstatin have been solved by X-ray crystallographic methods. The native pepsin structure has been refined with data collected to 2.2 Å resolution to an R-factor of 19.7%. The pepsin:pepstatin structure has been refined with data to 2.0 Å resolution to an R-factor of 18.5%. The hydrogen bonding interactions and the conformation adopted by pepstatin are very similar to those found in complexes of pepstatin with other aspartic proteinases. The enzyme undergoes a conformational change upon inhibitor binding to enclose the inhibitor more tightly. The analysis of the binding sites indicates that they form an extended tube without distinct binding pockets. By comparing the residues on the binding surface with those of the other human aspartic proteinases, it has been possible to rationalize some of the experimental data concerning the different specificities. At the S1 site, valine at position 120 in renin instead of isoleucine, as in the other enzymes, allows for binding of larger hydrophobic residues. The possibility of multiple conformations for the P2 residue makes the analysis of the S2 site difficult. However, it is possible to see that the specific interactions that renin makes with histidine at P2 would not be possible in the case of the other enzymes. At the S3 site, the smaller volume that is accessible in pepsin compared to the other enzymes is consistent with its preference for smaller residues at the P3 position.

Методами рентгеноструктурного анализа определена трехмерная структура человеческого пепсина и его комплекса с ингибитором пепстатином с разрешением 2.2 Å (R-фактор 19.7%) и 2.0 Å (R-фактор 18.5%) соответственно.

Конформация пепстатина и система его водородных связей аналогична таковым в комплексах с другими аспартильными протеиназами. Связывание ингибитора вызывает конформационную перестройку фермента, которая приводит к более плотному окружению пепстатина. Анализ показывает, что сайты связывания образуют протяженный канал, а не изолированные карманы.

Сравнение аминокислотного состава сайта связывания пепсина с другими аспартильными протеиназами человека позволило интерпретировать различия в субстратной специфичности. Наличие валина (вместо изолейцина) в позиции 120 S1-сайта ренина объясняет его способность связывать более крупные гидрофобные остатки. Анализ S2-сайта осложняется возможностью множественных конформаций P2-остатка, однако ясно, что специфичные для ренина взаимодействия с гистидином в P2 невозможны для других ферментов. Меньший объем S3-сайта пепсина коррелирует с его предпочтением к меньшим по размеру P3-остаткам.

Организм: Homo sapiens

Deposited: 1995-01-23

2. Википедия

Пепсин присутствует в желудочном соке человека, он является ферментом, который расщепляет центральные пептидные связи в молекулах белков и пептидов (эндопептидаза). То есть выполняет одну из важных ролей в превращении белков пищи в аминокислоты.

3. 3D-модуль

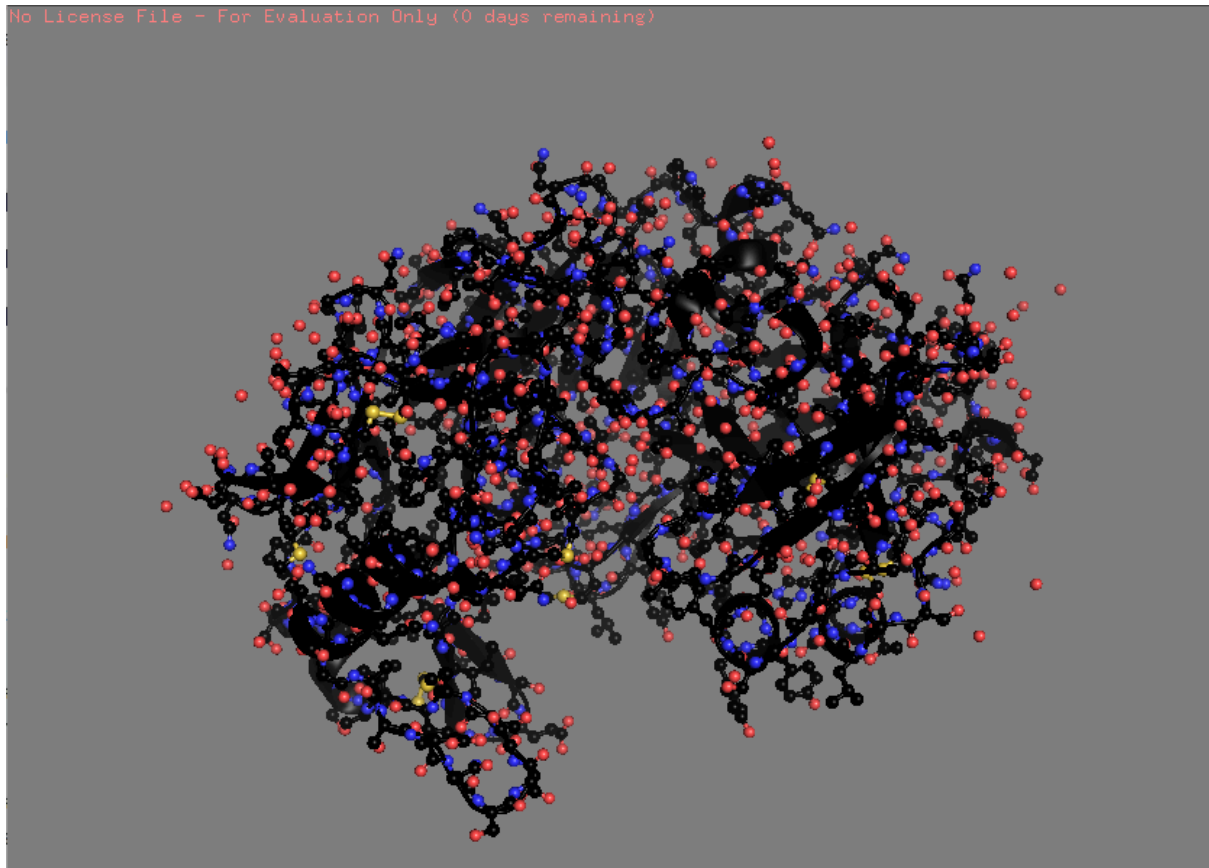


рис.1 полноатомное с раскраской по химическим элементам

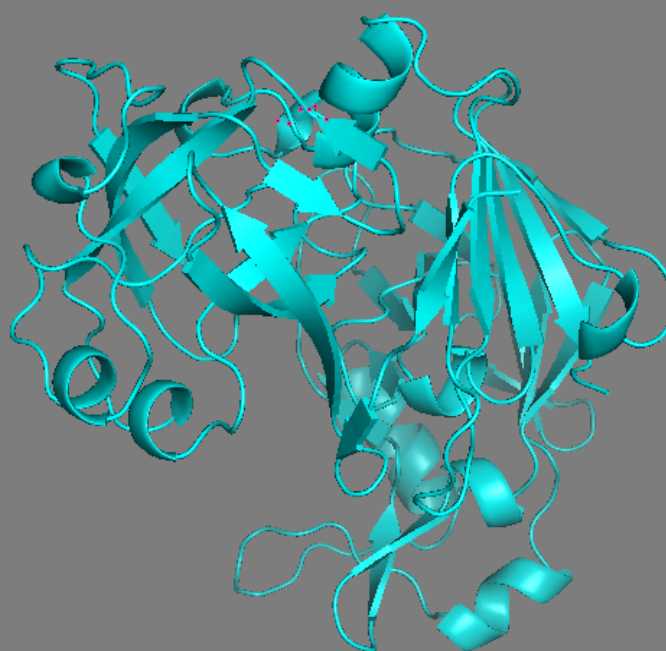


рис.2 основное с раскраской по цепям

4. Источники

[RCSB PDB - 1F32: КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА ИНГИБИТОРА ПЕПСИНА АСКАРИД-3](#)