

**МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ РЕСПУБЛИКИ БЕЛАРУСЬ
БЕЛОРУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ФАКУЛЬТЕТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ И ИНФОРМАТИКИ**

Кафедра биоинформатики

Реферат

По лекциям:

Лекция 1. Аминокислоты – мономеры белков

Лекция 2. Белки – “молекулярные машины”

Лекция 3. Структура белков

Лекция 4. Ионные и водородные связи

Лекция 5. Взаимодействия, стабилизирующие структуру белка

Благодарного Артёма Андреевича
студента 4 курса, 3 группы
специальности «Информатика»
дисциплина «Моделирование
биомолекул»

Минск, 2025

Лекция 1. Аминокислоты – мономеры белков

Введение

Лекция 1 посвящена фундаментальной биохимической основе всех белковых молекул — аминокислотам. Понимание строения, свойств и классификаций аминокислот является отправной точкой для последующего изучения структуры белков и методов их компьютерного моделирования. В лекции рассматриваются как молекулярная (химическая) сторона аминокислот, так и их биологическое значение в формировании функций белков.

1. Химическая структура аминокислот

- **Общая формула:** α -атом углерода (C_α) связан с аминогруппой ($-NH_2$), карбоксильной группой ($-COOH$), атомом водорода и боковой цепью R .
 - **Элементы:** C, H, O, N; в боковых группах иногда S (цистеин, метионин) и др.
 - **Исключения/особенности:** пролин — циклическая (иминокислота), где боковая цепь замыкается на аминный азот; глицин — не оптически активен ($R = H$).
 - **Пептидная связь:** образуется между карбоксильной группой одной аминокислоты и аминогруппой другой с выделением воды (реакция дегидратации). Пептидная связь имеет частично двойничный характер (резонанс), что ограничивает её вращение и придаёт планарность амидного фрагмента.
-

2. Физико-химические свойства

- **Амфотерность и цвиттер-ионы:** в водном растворе аминокислоты обычно существуют в форме цвиттер-ионов. Протонирование/дезпротонирование зависит от pH.
 - **Изоэлектрическая точка (pI):** pH, при котором суммарный заряд равен нулю — важный параметр для электрофореза, солubilitи и моделирования электростатических взаимодействий.
 - **Оптическая активность:** большинство α -аминокислот имеют хиральный центр (L и D), в белках почти исключительно L-изомеры.
 - **Полярность и гидрофобность:** боковые группы определяют распределение в структуре — гидрофобные остатки стремятся в ядро, полярные/заряженные — на поверхность или в активные центры.
 - **Реакционно-функциональные группы:** некоторые боковые цепи могут образовывать дисульфидные связи (Cys–Cys), участвовать в кислотно-основных реакциях (Asp, Glu, Lys, His), образовывать водородные связи и ионные взаимодействия.
-

3. Классификации аминокислот (с примерами)

- **По строению боковой цепи:** алифатические (Ala, Val, Leu, Ile), ароматические (Phe, Тир, Трп), серосодержащие (Cys, Met), гетероциклические (His, Pro, Trp).
 - **По кислотно-щелочным свойствам:** кислые (Asp, Glu), основные (Lys, Arg, His), нейтральные.
 - **По полярности:** полярные (серосодержащие, гидроксильные), неполярные (гидрофобные).
 - **По физиологической значимости:** незаменимые (не синтезируются) и заменимые.
 - **Практическая значимость:** классификации помогают предсказывать вторичную структуру, расположение в белке, участие в каталитических центрах и взаимодействие с лигандами.
-

4. Уровни организации белковой структуры

1. **Первичная структура** — линейная последовательность аминокислот (пептидная цепь).
 2. **Вторичная структура** — локальные элементы (α -спираль, β -лист, петли), удерживаемые главным образом водородными связями между амидными группами пептидного остова.
 3. **Третичная структура** — пространственное складывание всей полипептидной цепи; стабилизируется гидрофобными взаимодействиями, дисульфидными мостиками, ионными и ван-дер-ваальсовыми взаимодействиями.
 4. **Четвертичная структура** — ассоциация нескольких полипептидных цепей (субъединиц) в функциональный комплекс.
-

5. Свойства белков и их поведение

- **Амфотерность и рI** (см. выше).
 - **Растворимость:** зависит от состава поверхностных остатков и среды (ионная сила, pH, температура).
 - **Денатурация:** потеря нативной структуры при действии температуры, pH, детергентов; может быть обратимой или необратимой.
 - **Шапероны:** белки-помощники, способствующие правильному сворачиванию и предотвращающие агрегацию.
 - **Функции белков:** ферментативная, структурная, транспортная, регуляторная, защитная, энергетическая и др.
-

6. Дополнительные важные темы (для моделирования)

Эти разделы особенно важны, если цель курса — переход к компьютерному моделированию.

6.1. Конформации и ротамеры

- **Боковые цепи** имеют вращение вокруг χ -углов (ротамеры). При моделировании используют ротамерные библиотеки.
- **Форма пептидной связи и ограничения (ϕ , ψ углы)** отображаются в **диаграмме Рамачандрана** — инструмент для проверки допустимых вторичных структур.

6.2. Протонирование и рК_a остатков

- Заряд остатка зависит от локальной среды и pH; в моделях важно правильно назначать протонированные состояния (особенно для His, Asp, Glu, Lys, Cys, Tyr). Это влияет на электростатику и результаты расчётов.

6.3. Ковалентные модификации и мостики

- **Дисульфидные мостики (S–S)** — важны для стабильности некоторых белков.
- **Посттрансляционные модификации (PTMs)** — фосфорилирование, гликозилирование и др. — меняют свойства белка и должны учитываться при моделировании.

6.4. Взаимодействие с растворителем и ионами

- Водная оболочка и ионы существенно влияют на структуру и динамику. При моделировании используются модели воды (TIP3P, SPC и др.) и параметры ионов.

6.5. Экспериментальные данные и валидация моделей

- **Источник структур:** X-ray, NMR, стюо-EM. При построении моделей важно сравнивать и валидировать результаты с экспериментальными данными (R-фактор, RMSD, химические смещения и т.д.).

7. Связь с методами компьютерного моделирования

- **Представления молекулы:** атомистические (все атомы) и грубые (coarse-grained).
- **Энергетические функции / force fields:** параметры, определяющие потенциалы связей, углов, ненативных взаимодействий; примеры: AMBER, CHARMM, OPLS (термины для дальнейшего изучения).
- **Молекулярная динамика (MD):** численное интегрирование уравнений движения для изучения динамики молекул.

- **Методы гибридного уровня:** локальное квантово-механическое (QM)/молекулярно-механическое (MM) моделирование для реакций в активных центрах.
 - **Стратегии прогнозирования структуры:** гомология (comparative modeling), аб иницио методы, гибридные подходы, RAG/ML-подходы для предсказания свойств.
 - **Практические аспекты моделирования:** подготовка структуры (добавление водорода, определение протонирования), минимизация энергии, постановка задачи и её валидация.
-

Заключение

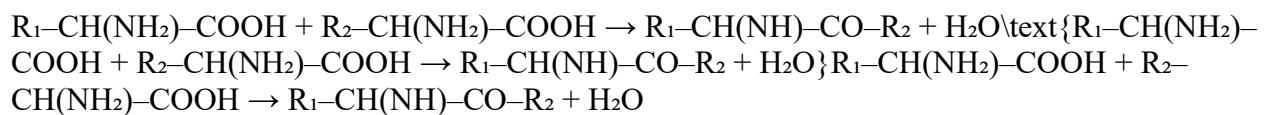
- Белки — полимеры аминокислот, соединённых пептидными связями.
- Образование пептидной связи — реакция конденсации (отделяется H_2O).
- Четыре уровня организации структуры: первичная, вторичная, третичная, четвертичная.
- Свойства белков: амфотерность, pI , растворимость, денатурация.
- Шапероны помогают правильному сворачиванию.
- Функции белков включают каталитическую, структурную, транспортную, регуляторную, защитную и энергетическую роли.
- Для моделирования важны: точное представление аминокислот (ротамеры, протонирование), учет растворителя и ионов, правильный выбор force field и валидация модели по экспериментальным данным.

Лекция 2. Белки – “молекулярные машины”

1. Пептидная связь и её свойства

Пептидная связь — это химическая связь, соединяющая аминокислоты в полипептидную цепь.

Она образуется при взаимодействии **α -карбоксильной группы (-COOH)** одной аминокислоты с **α -аминогруппой (-NH₂)** другой. В результате реакции конденсации выделяется молекула воды, а аминокислоты соединяются в цепочку:



Пептидная связь имеет **частично двойной характер**, что делает её **жёсткой и плоской** — вращение вокруг неё ограничено. Все атомы, входящие в состав пептидной группы, лежат в одной плоскости. Благодаря этому белковая цепь сохраняет определённую ориентацию в пространстве.

Существует **цис- и транс-изомерия**, при этом **транс-форма** более устойчива из-за меньшего стерического отталкивания между заместителями.

Каждый белок имеет **N-конец** (начало цепи, свободная NH₂-группа) и **C-конец** (конец цепи, свободная COOH-группа), что придаёт ему направленность.

2. Классификация белков

Белки можно классифицировать по различным признакам:

1. По составу:

- **Простые (протеины)** — состоят только из аминокислот (альбумины, глобулины, кератин).
- **Сложные (протеиды)** — содержат небелковую часть (простетическую группу):
 - *Гликопротеины* — с углеводами;

- *Липопротеины* — с липидами;
- *Металлопротеины* — с ионами металлов (Fe, Cu, Zn);
- *Фосфопротеины* — с фосфатами;
- *Хромопротеины* — с пигментами (гемоглобин, цитохромы).

2. По форме молекулы:

- **Фибриллярные белки** — вытянутые, нерастворимые, выполняют структурные функции (коллаген, кератин).
- **Гlobулярные белки** — компактные, хорошо растворимые, выполняют ферментативные и транспортные функции (ферменты, гормоны).
- **Мембранные белки** — встроены в липидные мембранны, участвуют в транспорте и передаче сигналов.

3. По биологической полноценности:

- **Полноценные** — содержат все незаменимые аминокислоты (мясо, рыба, молоко, яйца).
 - **Неполноценные** — не содержат полный набор (некоторые растительные белки, например, из злаков).
-

3. Функции белков

Белки выполняют огромное разнообразие функций в организме, выступая настоящими «молекулярными машинами»:

- **Каталитическая** — ферменты ускоряют биохимические реакции (амилаза, пепсин).
 - **Регуляторная** — контролируют активность генов и гормональные процессы (инсулин, рецепторы).
 - **Рецепторная** — воспринимают сигналы внешней среды.
 - **Иммунная** — антитела (иммуноглобулины) распознают чужеродные вещества.
 - **Структурная** — входят в состав тканей, волос, клеточных мембран (кератин, коллаген).
 - **Транспортная** — переносят вещества (гемоглобин переносит кислород).
 - **Энергетическая** — при распаде белков выделяется энергия (4,1 ккал/г).
 - **Механическая** — обеспечивают движение (актин, миозин в мышцах).
-

4. Свойства белков

Белки обладают рядом физико-химических свойств, определяющих их биологическую активность.

Амфотерность — способность проявлять свойства кислот и оснований. Это связано с наличием и кислотных ($-COOH$), и основных ($-NH_2$) групп, поэтому белки могут вступать в реакции как с кислотами, так и со щелочами.

Изоэлектрическая точка (pI) — значение pH, при котором суммарный заряд белковой молекулы равен нулю. В этой точке белки наименее растворимы и легко выпадают в осадок.

Коллоидная природа — белки образуют устойчивые коллоидные растворы в воде, где молекулы окружены слоем воды и ионов.

5. Растворимость и гидратация

Растворимость белков зависит от их структуры и свойств среды.

- **Альбумины и глобулины** растворимы в воде или слабых солевых растворах.
- **Фибриллярные белки** (например, кератин, фибронин шёлка) практически нерастворимы.

Гидратация — процесс образования водной оболочки вокруг молекулы белка.

Молекулы водыдерживаются за счёт водородных связей и электростатического притяжения.

Гидратационная оболочка обеспечивает устойчивость белковых растворов и играет важную роль в биологических мембранах и клеточных процессах.

6. Денатурация белков

Денатурация — это разрушение пространственной структуры белка без разрыва пептидных связей.

При денатурации белок теряет нативную (рабочую) форму и, следовательно, свою биологическую активность.

Факторы, вызывающие денатурацию:

- изменение **температуры** (нагревание, замораживание);
- экстремальные значения **pH**;
- воздействие **солей тяжёлых металлов, органических растворителей или излучения**.

Пример — свертывание белков яйца при варке.

Денатурация может быть **обратимой** (ренатурация) или **необратимой**, когда структура теряется навсегда.

7. Шапероны

Шапероны — специальные белки, которые помогают другим белкам правильно сворачиваться (фолдинг). Они предотвращают агрегацию (слипание) полипептидных цепей и направляют их в правильное конформационное состояние.

Особенно активны шапероны при клеточном стрессе (например, при повышении температуры), поэтому их называют **белками теплового шока (Hsp — Heat Shock Proteins)**.

Без шаперонов многие белки сворачиваются неправильно, что может приводить к патологиям, включая болезни накопления белков, такие как болезнь Альцгеймера.

8. Структура белков

Белки — это линейные полимеры из аминокислотных остатков, которые формируют несколько уровней организации:

1. **Первичная структура** — последовательность аминокислот в цепи.
2. **Вторичная структура** — регулярные элементы (α -спираль, β -лист), стабилизированные водородными связями.
3. **Третичная структура** — пространственная укладка всей полипептидной цепи в глобулу.
4. **Четвертичная структура** — объединение нескольких глобул в общий белковый комплекс (например, гемоглобин состоит из 4 субъединиц).

Стабильность белковой структуры поддерживается различными взаимодействиями: водородными, ионными, гидрофобными и дисульфидными связями. Форма белка определяет его функцию.

9. Классификация белков по структурно-функциональным свойствам

По характеру структуры и выполняемым функциям белки подразделяются на:

- **Фибриллярные белки** — образуют волокна и обеспечивают прочность тканей (коллаген, эластин, кератин).
- **Глобулярные белки** — компактные, растворимые в воде, выполняют ферментативные, транспортные и регуляторные функции (альбумины, ферменты, антитела).
- **Мембранные белки** — встроены в клеточные мембранны, отвечают за транспорт веществ, передачу сигналов и межклеточные взаимодействия.

Заключение

Белки — это основа жизни и универсальные молекулярные машины, управляющие всеми процессами в клетке. Их структура определяет функции, а правильная пространственная организация — залог активности.

Понимание природы пептидной связи, свойств белков, их классификации и механизмов денатурации имеет огромное значение для биохимии, медицины и биотехнологии.

Лекция 3. Структура белков

Введение

Конформация белка — это пространственное расположение атомов в молекуле, определяющее её форму и биологическую активность. Конформация формируется в результате вращения вокруг связей между атомами основной цепи и боковых радикалов аминокислот. Несмотря на огромный набор возможных конформаций, в клетке каждая белковая молекула обычно принимает одну наиболее стабильную форму — **нативную конформацию**, которая соответствует минимальной свободной энергии.

Изменение конформации может происходить при взаимодействии белка с другими молекулами (лигандом, ионом, субстратом), что лежит в основе многих биологических процессов, включая ферментативную каталитику и передачу сигналов.

Принципы структурной организации белков

Белки обладают многоуровневой организацией структуры, которая обеспечивает их функциональную специфичность.

Основные уровни структурной организации:

1. **Первичная структура** — линейная последовательность аминокислотных остатков.
2. **Вторичная структура** — локальные элементы упорядоченности (α -спиралы, β -листы, петли).
3. **Третичная структура** — трёхмерная конфигурация полипептидной цепи.
4. **Четвертичная структура** — объединение нескольких полипептидных цепей в функциональный комплекс.

Формирование всех уровней структуры определяется как **внутренними взаимодействиями** (водородные связи, гидрофобные, ионные, дисульфидные), так и **влиянием водной среды**.

Первичная структура

Первичная структура белка представляет собой **последовательность аминокислот**, соединённых пептидными связями. Она полностью кодируется в ДНК и определяет все

последующие уровни организации.

Даже одно изменение аминокислоты (мутация) может радикально изменить свойства белка. Примером служит **серповидноклеточная анемия**, возникающая из-за замены глутаминовой кислоты на валин в β -цепи гемоглобина.

Регулярные вторичные структуры

α -спираль

Это правая спираль, стабилизированная **внутримолекулярными водородными связями** между атомом кислорода карбонильной группы одной аминокислоты и атомом водорода аминогруппы другой, расположенной через четыре остатка.

Каждый виток содержит ~3,6 аминокислотных остатка. α -спирали характерны для глобулярных белков (например, миоглобина).

β -складчатый лист

Формируется за счёт **межцепочных водородных связей** между соседними участками цепи. Сегменты могут быть ориентированы **параллельно** или **антиспараллельно**. β -листы придают белку жёсткость и прочность. Пример — белок фибронин шелка.

Нерегулярные вторичные структуры

К нерегулярным элементам относятся **петли** и **β -изгибы**.

- **Петли** соединяют участки регулярных структур (например, две α -спирали или спираль и β -лист). Они гибкие и подвижные.
- **β -изгибы** — короткие участки (из 3–4 аминокислот), которые позволяют цепи резко изменить направление.

Эти структуры часто расположены на поверхности белка и участвуют в взаимодействии с другими молекулами.

Функциональная роль петель в формировании третичной структуры

Петли играют ключевую роль в **укладке полипептидной цепи и создании активных центров**.

Они обеспечивают:

- формирование специфической формы белка;
- соединение вторичных структур в единую трёхмерную конфигурацию;
- участие в связывании лигандов, ионов и других белков;

- гибкость, необходимую для катализа и регуляции активности ферментов.

Примером являются петли в каталитических центрах ферментов (например, сериновых протеаз).

Карта Рамачандрана

Карта Рамачандрана отображает допустимые значения **диэдральных углов ϕ (фи) и ψ (пси)** в пептидной цепи.

Эти углы описывают вращение вокруг связей N–Ca и Ca–C соответственно. Из-за стерических ограничений не все комбинации углов возможны.

На карте выделены области, соответствующие наиболее стабильным конформациям:

- область α -спиралей,
- область β -листов,
- и реже встречающиеся участки, например, для левозакрученных спиралей.

Карта Рамачандрана используется для проверки корректности моделей белков в структурной биологии.

Третичная и четвертичная структуры белков

Третичная структура

Это **трёхмерная форма одной полипептидной цепи**, определяющая её функциональные свойства.

Стабилизируется различными типами взаимодействий:

- **гидрофобными** — между неполярными радикалами;
- **ионными** — между заряженными группами;
- **дисульфидными мостиками** — между остатками цистеина;
- **водородными связями**.

Пример: глобулярная структура миоглобина.

Четвертичная структура

Возникает при **объединении нескольких полипептидных цепей** (субъединиц) в функциональный комплекс.

Взаимодействие между субъединицами регулирует активность белка.

Пример: **гемоглобин**, состоящий из четырёх субъединиц (две α и две β).

Заключение

Структура белков — это фундамент, определяющий их функции в живых организмах. От линейной последовательности аминокислот до сложной четвертичной организации — каждый уровень играет важную роль в обеспечении стабильности, специфичности и активности белков. Современные методы моделирования и структурного анализа (например, карта Рамачандрана, рентгеноструктурный анализ, крио-ЭМ) позволяют глубже понять взаимосвязь между структурой и функцией этих «молекулярных машин» жизни.

Лекция 4. Ионные и водородные связи

Введение

Белки — это биополимеры, выполняющие ключевые функции в живых организмах: катализ, транспорт, защита, структурная поддержка и регуляция. Их биологическая активность напрямую зависит от пространственной структуры, которая формируется в процессе сворачивания (фолдинга). В основе формирования структуры лежат слабые и ковалентные взаимодействия, в частности ионные, водородные и дисульфидные связи.

1. Фолдинг белка

Фолдинг — это процесс, в ходе которого полипептидная цепь принимает свою нативную (функционально активную) трёхмерную структуру. Первичная структура белка, представляющая собой последовательность аминокислот, определяет все последующие уровни организации — вторичную, третичную и четвертичную.

Процесс фолдинга может происходить спонтанно, если последовательность белка содержит всю необходимую информацию для образования нативной структуры. Однако в клетке этот процесс часто контролируется специальными белками — **шаперонами**, которые предотвращают неправильное сворачивание и агрегацию.

Ошибки в фолдинге приводят к потере функции белка и развитию заболеваний, например болезни Альцгеймера, Паркинсона или прионных инфекций.

2. Ионные и водородные связи

Ионные связи

Ионные (электростатические) взаимодействия возникают между заряженными боковыми группами аминокислот — положительно заряженными (лизин, аргинин, гистидин) и отрицательно заряженными (аспартат, глутамат). Эти связи стабилизируют третичную и четвертичную структуры белков, особенно в гидрофильных областях, находящихся на поверхности молекулы.

Водородные связи

Водородная связь образуется между атомом водорода, связанным с электроотрицательным атомом (например, N–H или O–H), и другим

электроотрицательным атомом, имеющим неподеленную пару электронов. В белках водородные связи ответственны за стабилизацию вторичной структуры:

- **α -спираль** формируется за счёт водородных связей между атомами внутри одной цепи;
- **β -слои (складчатые листы)** — за счёт водородных связей между соседними полипептидными цепями.

Водородные связи также играют роль в поддержании третичной структуры, участвуя во взаимодействиях между удалёнными участками цепи.

3. Дисульфидные связи в белках

Дисульфидные связи — это ковалентные связи, образующиеся между двумя остатками цистеина, содержащими сульфгидрильные (-SH) группы. При их окислении возникает дисульфидная связь (-S-S-), которая значительно повышает устойчивость белка к денатурации.

Эти связи чаще всего встречаются в **внеклеточных белках**, где условия окислительные. Внутриклеточные белки обычно не содержат дисульфидных мостиков, так как внутри клетки поддерживается восстановительная среда.

Дисульфидные мостики выполняют роль «скрепок», стабилизирующих третичную и четвертичную структуру, а также способствуют правильному фолдингу, предотвращая образование неправильных конформаций.

Заключение

Фолдинг белка — сложный и высокоорганизованный процесс, обеспечивающий формирование функционально активной структуры. В его стабилизации участвуют различные типы связей: водородные и ионные — как слабые, но многочисленные взаимодействия, и дисульфидные — как прочные ковалентные связи. Понимание механизма фолдинга и роли этих взаимодействий является ключом к изучению биохимии, молекулярной биологии и к разработке методов лечения заболеваний, связанных с нарушением структуры белков.

Лекция 5. Взаимодействия, стабилизирующие структуру белка

Введение

Белки — это биополимеры, выполняющие в клетке широкий спектр функций: катализитическую, транспортную, сигнальную и структурную. Их биологическая активность определяется пространственной конфигурацией, или конформацией, которая стабилизируется различными типами химических взаимодействий. Среди них особое значение имеют электростатические, водородные, гидрофобные и дисульфидные взаимодействия. Эти силы обеспечивают правильное сворачивание белков и устойчивость их структуры в физиологических условиях.

1. Электростатические взаимодействия (ионные связи)

Электростатические взаимодействия возникают между положительно и отрицательно заряжёнными боковыми группами аминокислотных остатков. Примерами таких остатков являются:

- положительно заряженные — **лизин, аргинин, гистидин**,
- отрицательно заряженные — **аспартат и глутамат**.

Эти взаимодействия, называемые также **ионными связями или солевыми мостиками**, играют важную роль в стабилизации третичной и четвертичной структуры белка. Они особенно значимы в поверхностных областях белков, где могут взаимодействовать с молекулами воды или другими полярными компонентами.

Сила электростатических взаимодействий зависит от расстояния между зарядами и диэлектрической проницаемости среды: чем выше полярность растворителя (например, воды), тем слабее связь.

2. Электроотрицательность атомов

Электроотрицательность — это способность атома притягивать к себе общие электронные пары в химической связи. В белках электроотрицательные атомы — **кислород, азот и сера** — играют ключевую роль в формировании полярных связей и слабых взаимодействий.

Различия в электроотрицательности атомов создают **диполи**, то есть области частичного положительного и отрицательного заряда. Эти диполи являются основой для образования **водородных и электростатических связей**, которые стабилизируют белковую структуру.

3. Водородные связи

Водородная связь — это слабое, но направленное взаимодействие, возникающее между атомом водорода, связанным с электроотрицательным атомом (донором), и другим электроотрицательным атомом (акцептором), имеющим неподеленную электронную пару.

В белках водородные связи обеспечивают стабильность **вторичной структуры**:

- в **α -спирали** — между атомами внутри одной полипептидной цепи (между N—H и C=O группами через четыре остатка),
- в **β -слое** — между соседними участками цепи, расположенными параллельно или антипараллельно.

Кроме того, водородные связи участвуют в формировании **третичной структуры** и взаимодействиях между субъединицами белка в **четвертичной структуре**.

4. Механизм образования водородной связи

Механизм образования водородной связи основан на неравномерном распределении электронов в полярных ковалентных связях.

1. Электроотрицательный атом (например, кислород) притягивает электроны сильнее, чем водород, создавая частичный отрицательный заряд (δ^-) на себе и положительный (δ^+) на водороде.
2. Водород с положительным частичным зарядом притягивается к другому электроотрицательному атому, образуя мостик — водородную связь.

Эта связь слабее ковалентной, но в белках действует **в совокупности** с множеством других, что придаёт белковой молекуле устойчивость.

5. Гидрофобные взаимодействия

Гидрофобные взаимодействия не являются химическими связями в прямом смысле, но оказывают сильное влияние на пространственную организацию белка.

Они возникают вследствие стремления **неполярных боковых цепей** (например, валин, лейцин, изолейцин, фенилаланин) избегать контакта с водой.

В водной среде гидрофобные радикалы «собираются» внутри белковой глобулы, образуя **гидрофобное ядро**, а полярные группы ориентируются наружу. Этот процесс является основным фактором **фолдинга белков** и играет ключевую роль в стабилизации третичной структуры.

6. Дисульфидные связи (мостики)

Дисульфидные мостики — это **ковалентные связи**, образующиеся между двумя остатками цистеина. Их -SH группы окисляются с образованием дисульфидного мостика (-S-S-).

Эти связи особенно важны для белков, функционирующих во внеклеточной среде, где преобладают окислительные условия. Внутри клетки дисульфидные связи встречаются реже из-за восстановительной среды цитоплазмы.

Дисульфидные мостики выполняют роль «стяжек», повышая механическую и термическую устойчивость белка, а также предотвращая неправильное сворачивание.

Заключение

Стабильность и функциональность белков обеспечиваются совокупностью слабых и сильных химических взаимодействий. Электростатические и водородные связи, гидрофобные эффекты и дисульфидные мостики действуют совместно, создавая оптимальную трёхмерную конформацию белка.

Понимание природы этих взаимодействий позволяет глубже осознать принципы фолдинга белков, механизмы их функционирования и причины, по которым нарушения в структуре приводят к заболеваниям.