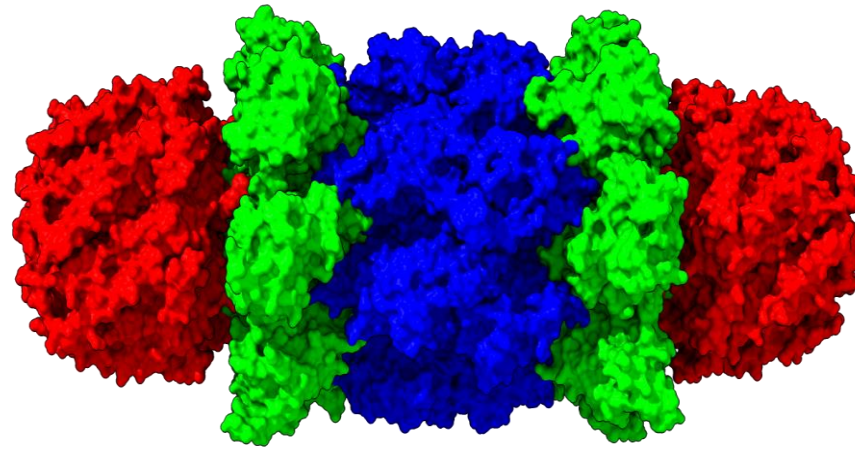
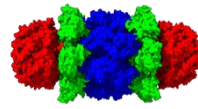
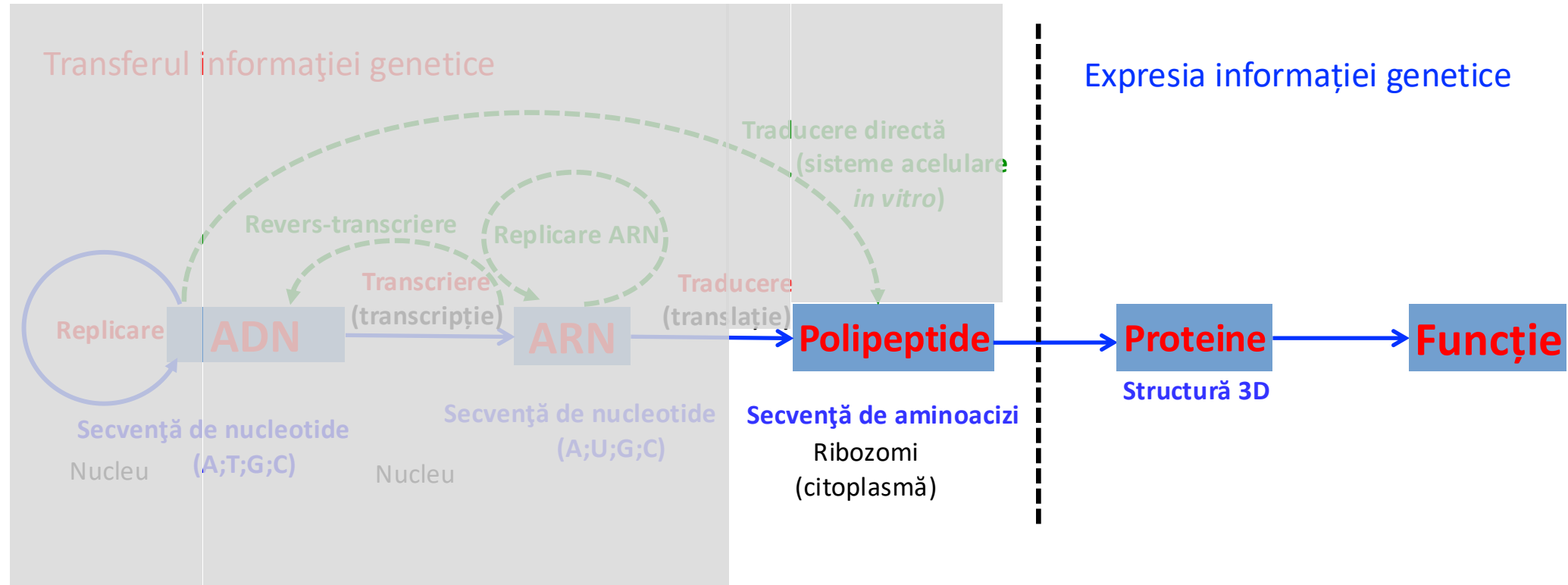


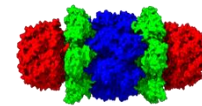


Capitolul I. Proteinele - suport material al funcțiilor biologice



Amplasarea cursului în traseul informației genetice





Principalele roluri ale proteinelor:

1) cataliza biologică – enzimele – proteine globulare ce catalizează în mod specific reacțiile celulare și metabolice;

Ex: alcool-dehidrogenaza – dehidrogenarea alcoolului etilic în aldehydă acetică;

2) apărare – anticorpii (imunoglobulinele) – proteine globulare ce recunosc potențialii agenți patogeni;

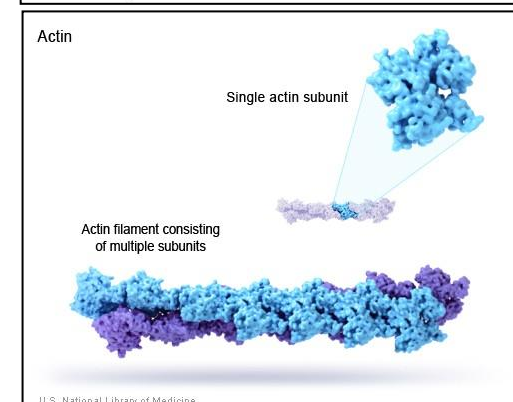
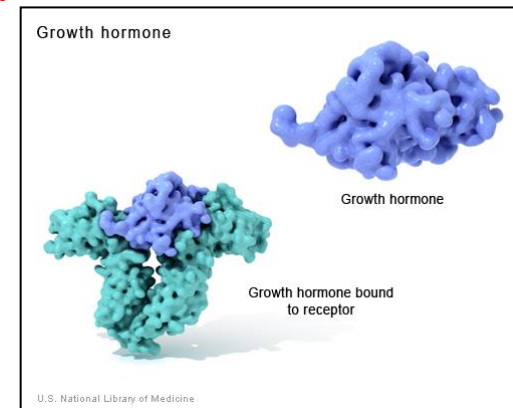
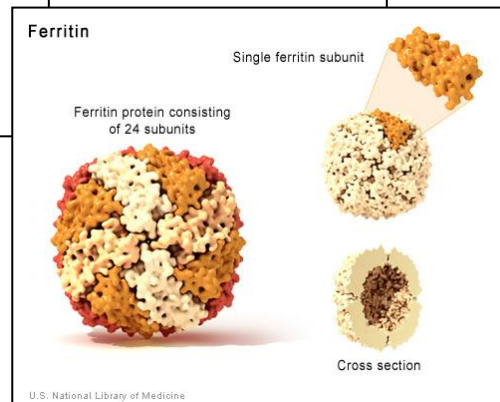
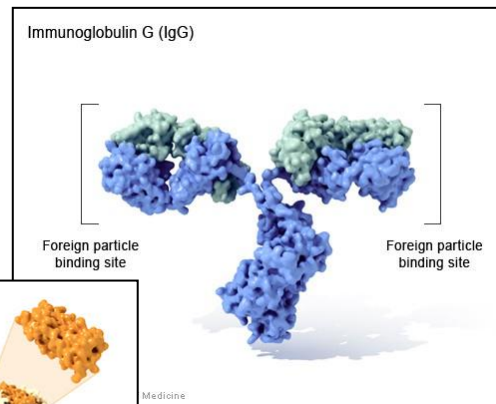
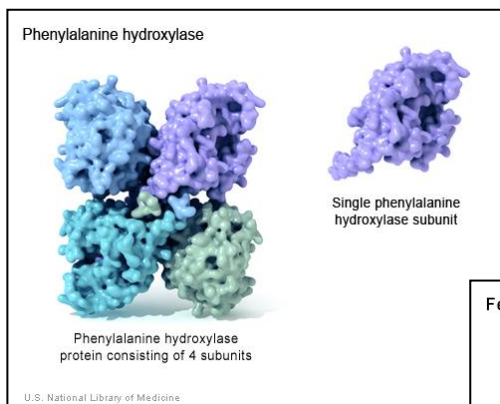
3) transport – proteine globulare ce vehiculează molecule sau ioni în organism sau în celule – hemoglobina;

4) structural – proteine fibrilare – cheratina din păr, colagenul din piele, ligamente;

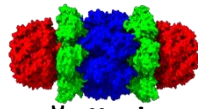
5) mișcare – proteinele fibrilare actina și miozina ce transformă energia chimică în mișcare;

6) reglare – proteine de dimensiuni mici ce funcționează ca mesageri intercelulari;

Majoritatea structurilor și funcțiilor fundamentale celei vii sunt realizate de proteine.



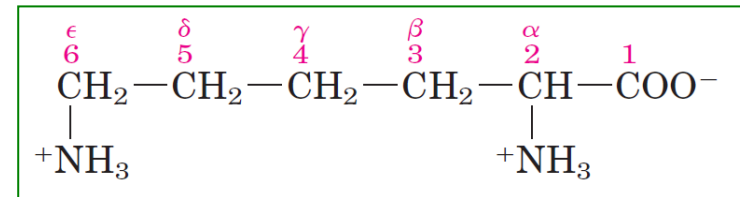
Structura proteinelor



Proteinele sunt **polimeri** rezultați în urma condensării unui număr mare de **L-aminoacizi** și formării de **legături peptidice**. Toate proteinele pot conține până la **20 aminoacizi proteinogeni** diferiți. Acest număr limitat de aminoacizi nu poate explica varietatea foarte mare de funcții pe care proteinele le îndeplinesc.

Funcția unei proteine nu este dată de tipul de aminoacizi conținut, ci de forma tridimensională pe care o adoptă.

Aminoacidul lizină



Aminoacizii proteinogeni

- conțin o grupare **amino**, o grupare **carboxil** și un **atom de H** legat de un atom de C central numit **C α**
- majoritatea (exceptând glicina) conțin o **catenă laterală R** legată de **C α** (atomul de C imediat vecin grupării Carboxil)

- deși **C α este asimetric**, aminoacizii proteinogeni sunt toți **izomeri L**. În natură există și D-aminoacizi, dar aceștia nu intră în structura proteinelor

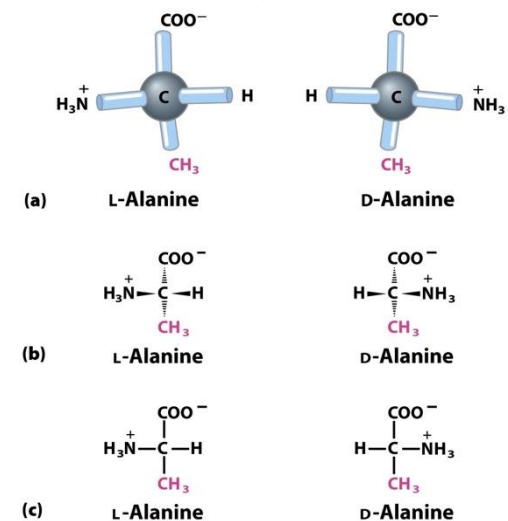
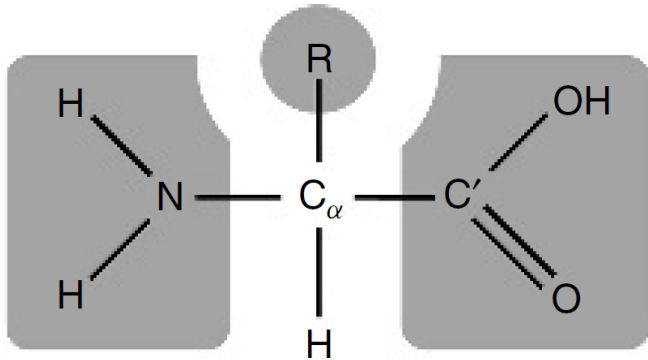
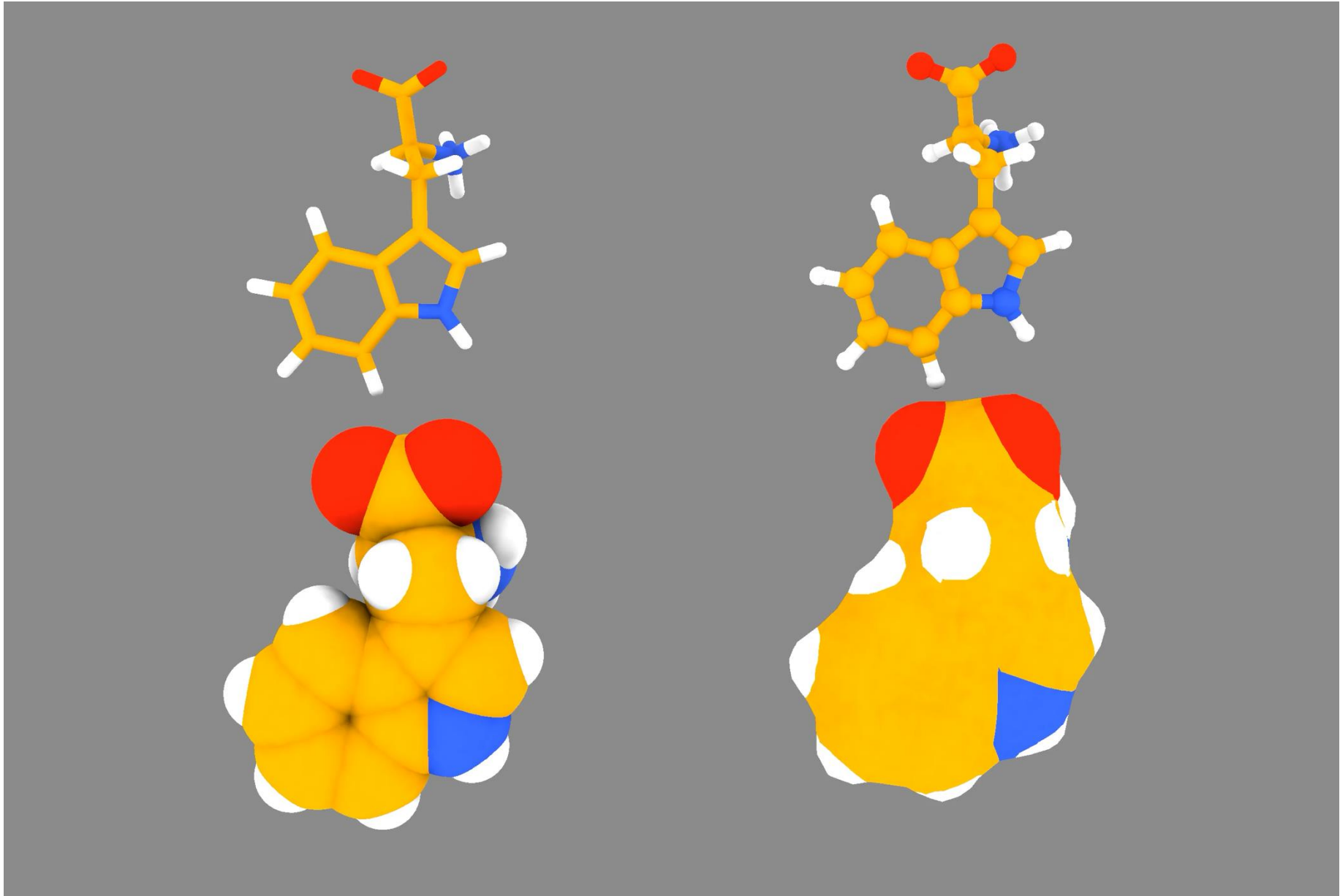
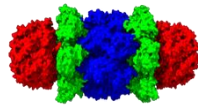
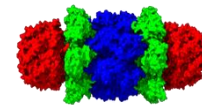


Figure 3-3
Lehninger Principles of Biochemistry, Fifth Edition
© 2008 W. H. Freeman and Company



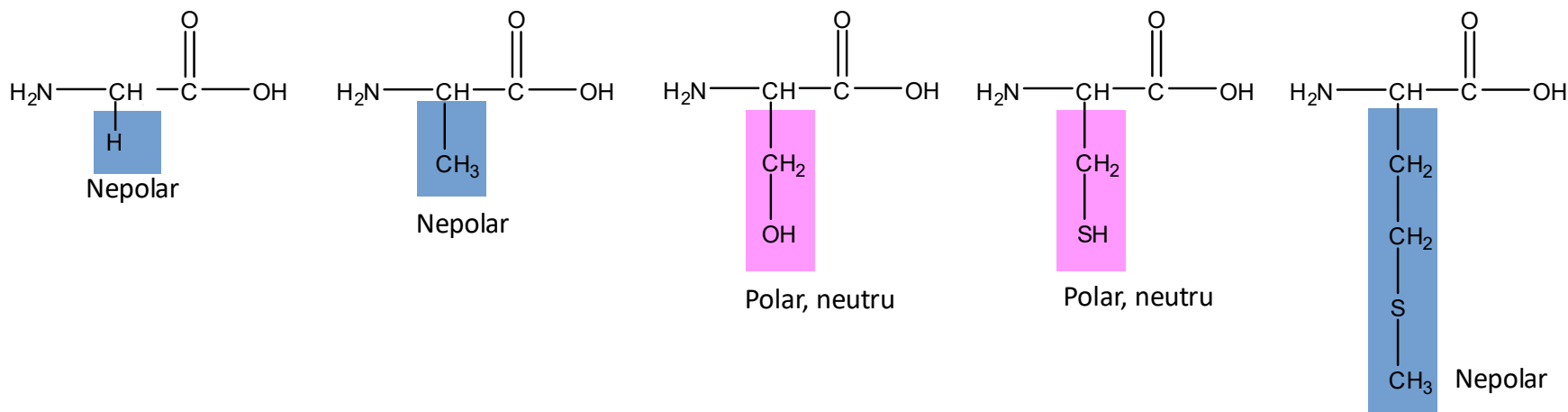


Aminoacizi – particularități structurale

Catenă laterală R conferă aminoacizilor proprietăți specifice. Funcție de proprietățile specifice, aminoacizii proteinogeni se clasifică în:

A. După tipul de catenă R:

1. Aminoacizi alifatici



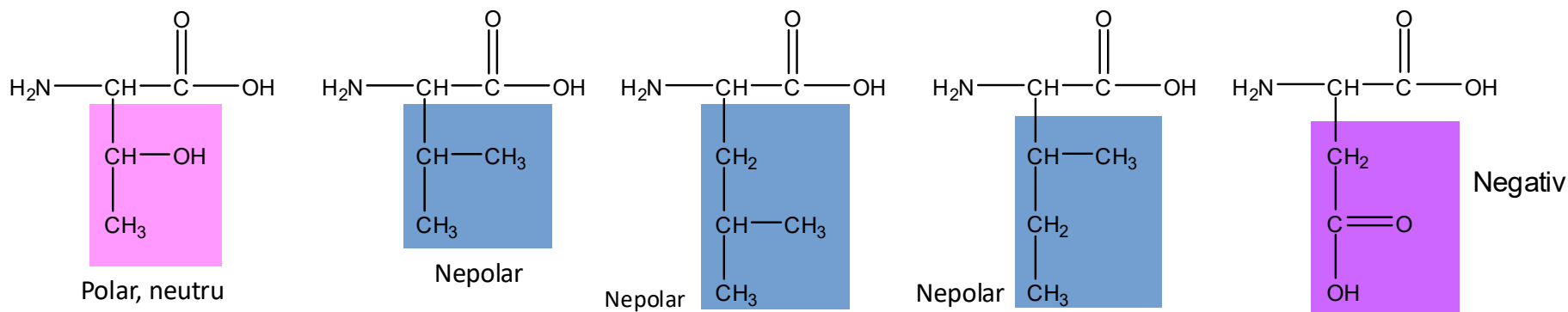
Glicocol, glicina (Gly, **G**)

α -Alanina (Ala, **A**)

Serina (Ser, **S**)

Cisteina (Cys, **C**)

Metionina (Met, **M**)



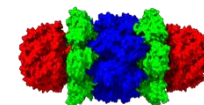
Treonina (Thr, **T**)

Valina (Val, **V**)

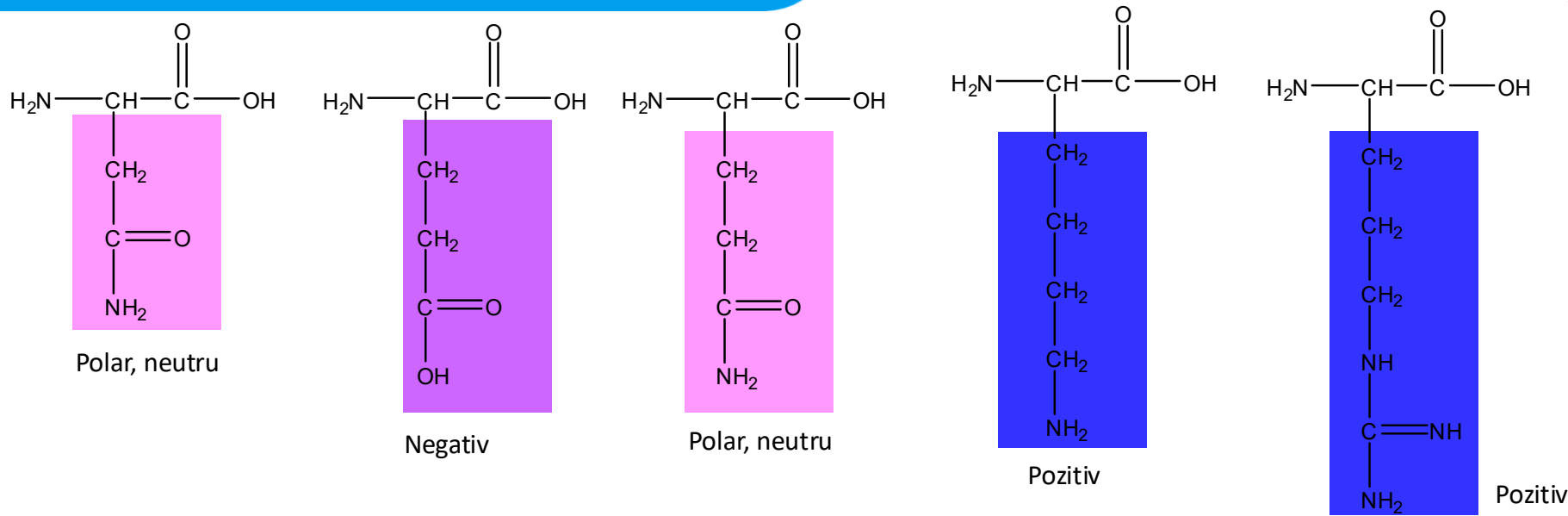
Leucina (Leu, **L**)

Izoleucina (Ile, **I**)

Acid aspartic (Asp, **D**)

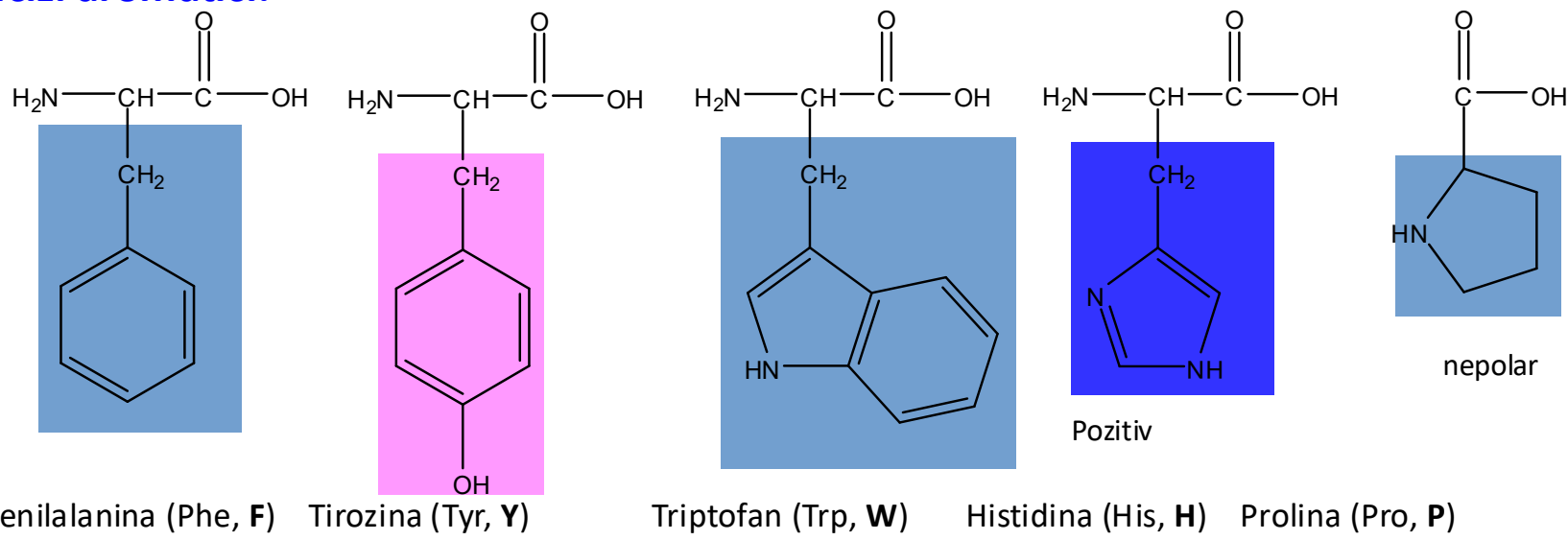


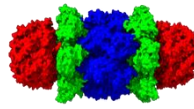
Aminoacizi – particularități structurale



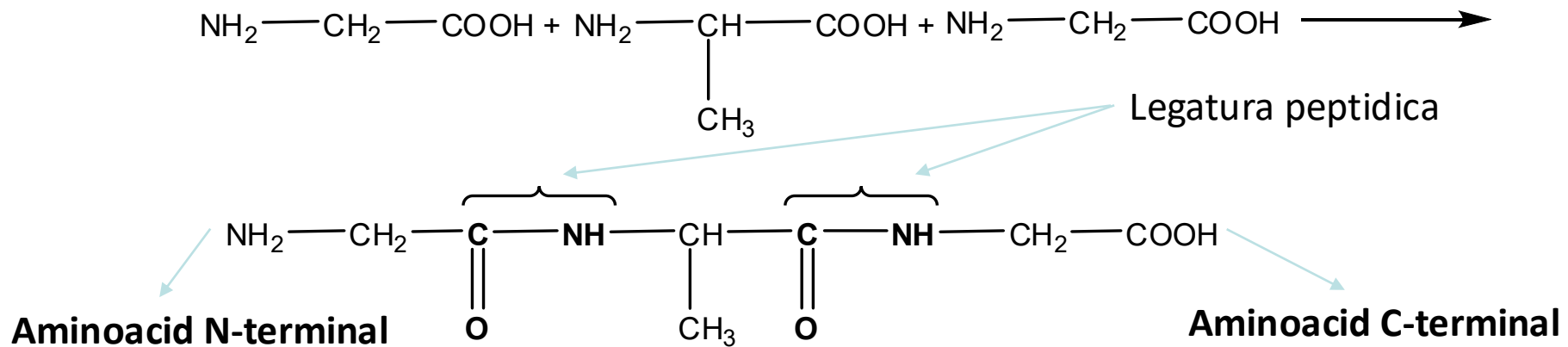
Asparagina (Asn, **N**) Acid glutamic (Glu, **E**) Glutamina (Gln, **Q**) Lizina (Lys, **K**) Arginina (Arg, **R**)

2. Aminoacizi aromatici:



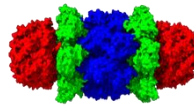


Aminoacizii pot realiza reacții de condensare cu eliminare de apă între grupele $-NH_2$ și $-COOH$, rezultând peptide sau proteine, în funcție de numărul de aminoacizi care participă la reacție. Legătura dintre aminoacizi se numește **legătură peptidică**. De exemplu, glicina și alanina se condensează formînd o tripeptidă numită glicil-alanil-glicina:



Reacția de condensare are loc în ribozomi. Aici, în medie **mai mult de 4 molecule NTP** sunt hidrolizate la NDP pentru a sintetiza 1 legătură peptidică dintr-o moleculă proteică. Bilantul energetic este de $4 \times 30,5 \text{ kJ/mol} = 122 \text{ kJ/mol}$ cheltuiți pentru a sintetiza o legătură peptidică ce conține 21 kJ/mol .

Acest cost energetic ridicat pentru sinteza unei legături peptidice se explică prin faptul că scopul în sine **nu este de a sintetiza legături peptidice oarecare**, ci de a **asambla aminoacizii într-o anumită ordine** (cine specifică ordinea?) pentru a forma un lant de aminoacizi clar definit. **Energia suplimentară are rol în a asigura inserarea corectă a aminoacizilor în procesul traducere a informației genetice.**



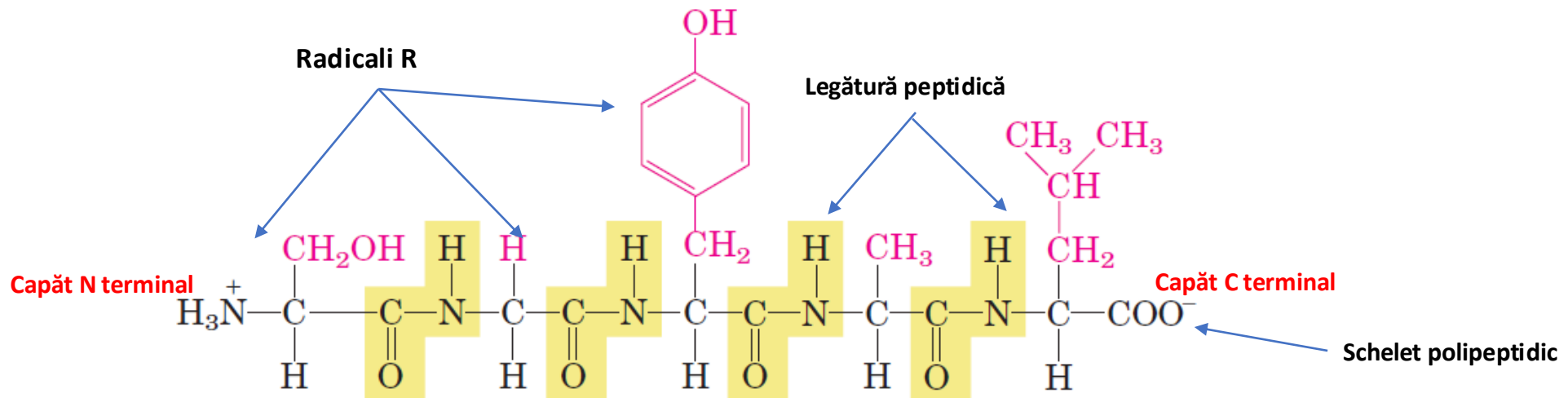
Lanțurile (catenele) de aminoacizi legați prin legături peptidice se pot clasifica **după numărul de aminoacizi** în:

Oligopeptide – conțin un număr mai mic de 10-20 aminoacizi;

Polipeptide - conțin un număr mai mare de 20 aminoacizi;

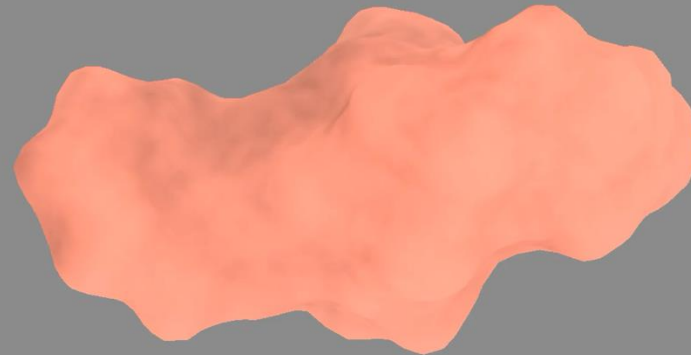
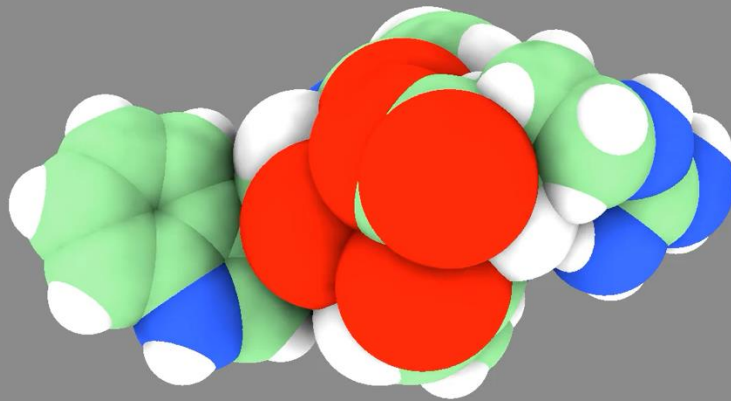
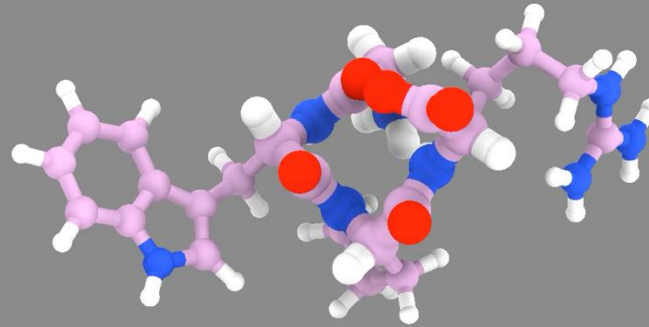
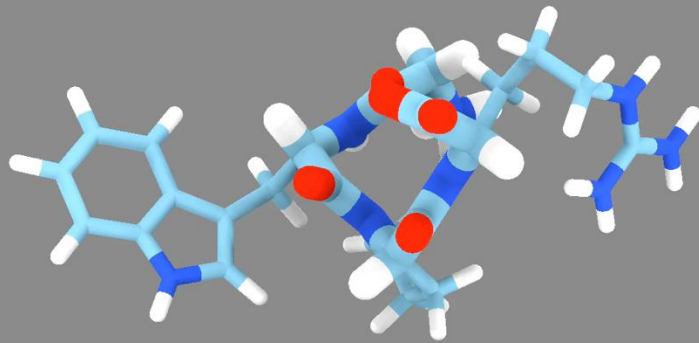
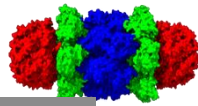
Proteine - conțin un număr mai mare de 50 aminoacizi;

Un aminoacid încorporat într-o catenă de aminoacizi este denumit **rest de aminoacid (aminoacid residue)**. Lanțul de aminoacizi este o înșiruire de unități **-NH-C α -CO-** conectate prin legături peptidice și poartă numele de **schelet polipeptidic (peptide backbone)**. Radicalii **R** specifici fiecărui aminoacid sunt **grefați pe C α** 'perpendicular' pe scheletul polipeptidic.

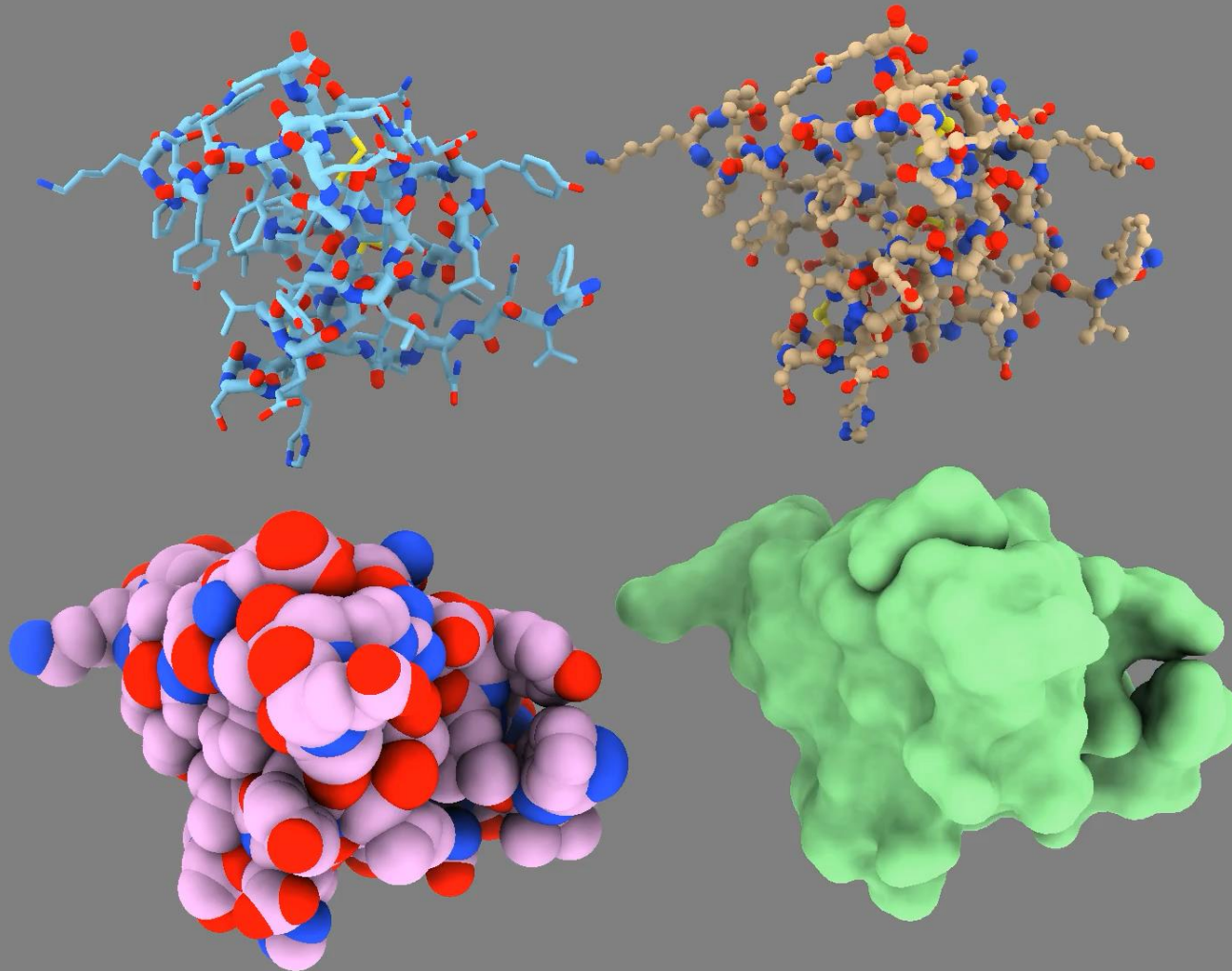
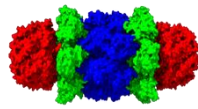


Pentapeptida Serilgliciltirosilalanilleucină sau Ser-Gly-Tyr-Ala-Leu sau SGYAL.

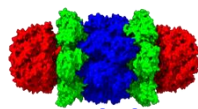
Prin convenție peptidele se numesc și se notează de la stânga la dreapta, în sensul sintezei lor de la capătul N terminal spre cel C terminal.



Diverse reprezentări ale unei peptide – un fragment din insulină



Structura proteinelor



Electronii π ai dublei legături C=O intră în rezonanță cu atomul de N și **legătura peptidică capătă caracter parțial de dublă legătură**. Legătura peptidică dintre atomul de C și N devine mai scurtă decât legătura C-N din amine **iar cei 2 atomi nu se mai pot roti liberi unul față de celălalt. Toți atomii grupării peptidice devin co-planari**, atomul de O din CO fiind în trans față de atomul de H din NH.

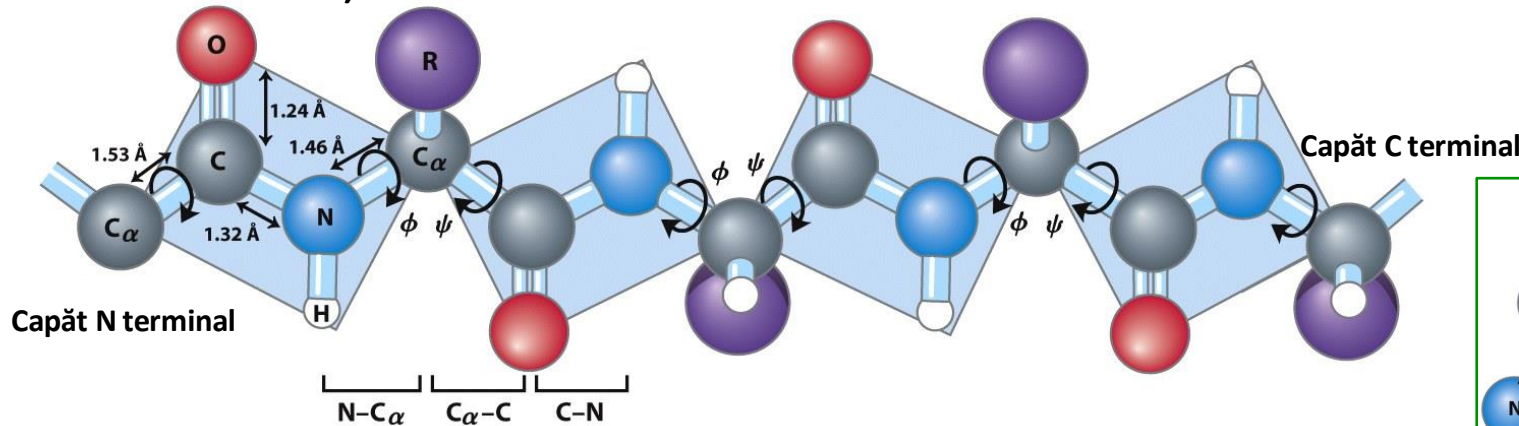
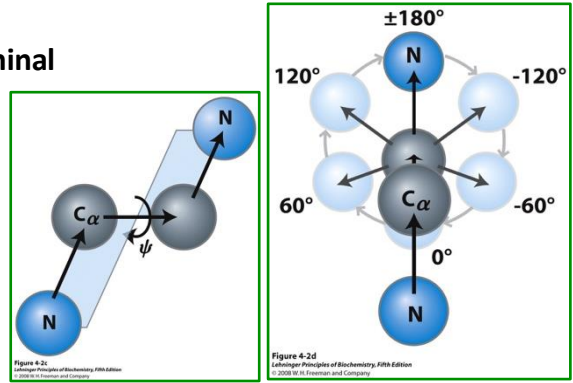


Figure 4-2b
Lehninger Principles of Biochemistry, Fifth Edition
© 2008 W.H. Freeman and Company



Catenele polipeptidice sunt împachetate în **conformații tridimensionale specifice**. În general, **plierea unei proteine în forma tridimensională specifică se realizează spontan, pe baza principiilor de minimizare a energiei**. Plierea corectă a proteinelor este **aminoacizii nepolari hidrofobi în interior, iar cei polari la exterior**, însă poate fi controlată enzimatic și corectată atunci când este cazul de către proteinele **chaperone**.

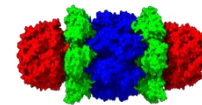
Există **4 nivele de organizare a structurii proteinelor**:

A. Structura primară - numărul, natura și succesiunea resturilor de aminoacizi = **secvența de aminoacizi**.

1 vls padktnv kaawgkvgah ageygaeale rmflsfpttk tyfphfdlsh gsaqvkgghgk
61 kvadaltnav ahvddmpnal salsdlhahk lrvdpvnfkl lshcllv tla ahlpaeftpa
121 vhasldkfla svstvltsky r

Capăt N terminal Secvența unei subunități a hemoglobinei Capăt C terminal

Câți aminoacizi are această catenă? Este o proteină sau o peptidă ?



B. Structura secundară - este reprezentată de orientarea spațială locală a unei catenei peptidice, independentă de forma restului de catenă peptidică.

Caracterul parțial de dublă legătură al legăturii peptidice și legăturile de H dintre $-C=O$ și $-NH$ favorizează apariția unor conformații sau structuri spațiale specifice. Două tipuri de structuri secundare sau dovedit a fi majoritare:

α -helix peptidic (α -helix)

Scheletul polipeptidic se poate curba și plia sub forma unui tirbușon. Plierea poate avea loc spre dreapta sau spre stânga. Deci helix-urile din proteine sunt orientate. Datorită unor restricții sterice, tirbușonul spre stânga se formează rar, **majoritatea helix-urilor din proteine sunt spre dreapta**.

Cel mai frecvent helix în proteine este α -helixul:

-Tirbușon răsucit spre dreapta, **o spiră completă are 3,6 resturi** de aminoacizi;

- **O din CO** al fiecărui rest aac formează o legătură de **H cu protonul din NH al celui de-al 4 rest aac**.

- **Toate legăturile de H posibile a fi realizate se formează**, structura secundară este stabilă.

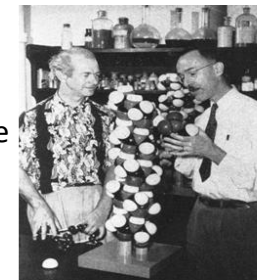
Doar în capetele helix-ului aminoacizii nu au parteneri pentru formarea de legături de H în cadrul aceluiasi helix.

Alte tipuri de helix-uri întâlnite în proteine:

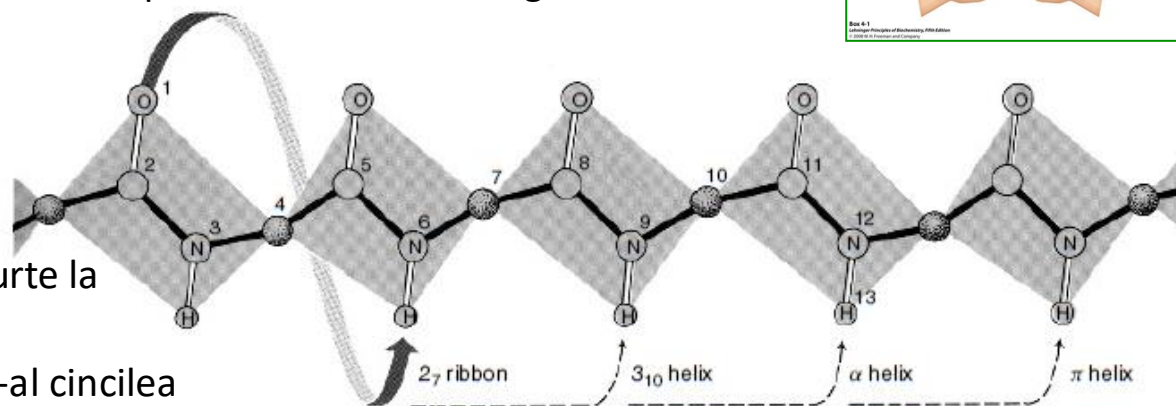
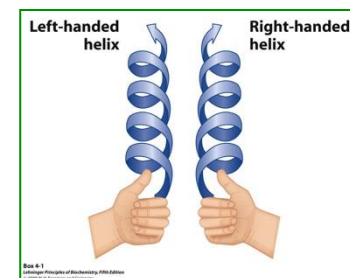
-**Helixul 2₇** – legătura de H se stabilește cu cel de-al doilea aminoacid;

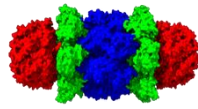
-**Helixul 3₁₀** – legătura de H se stabilește cu cel de-al treilea aminoacid, apare pe segmente scurte la capătul unui α -helix;

- **Helixul p** – legătura de H se stabilește cu cel de-al cincilea aminoacid, 4.4 aac pe spira, apare extrem de rar în proteine

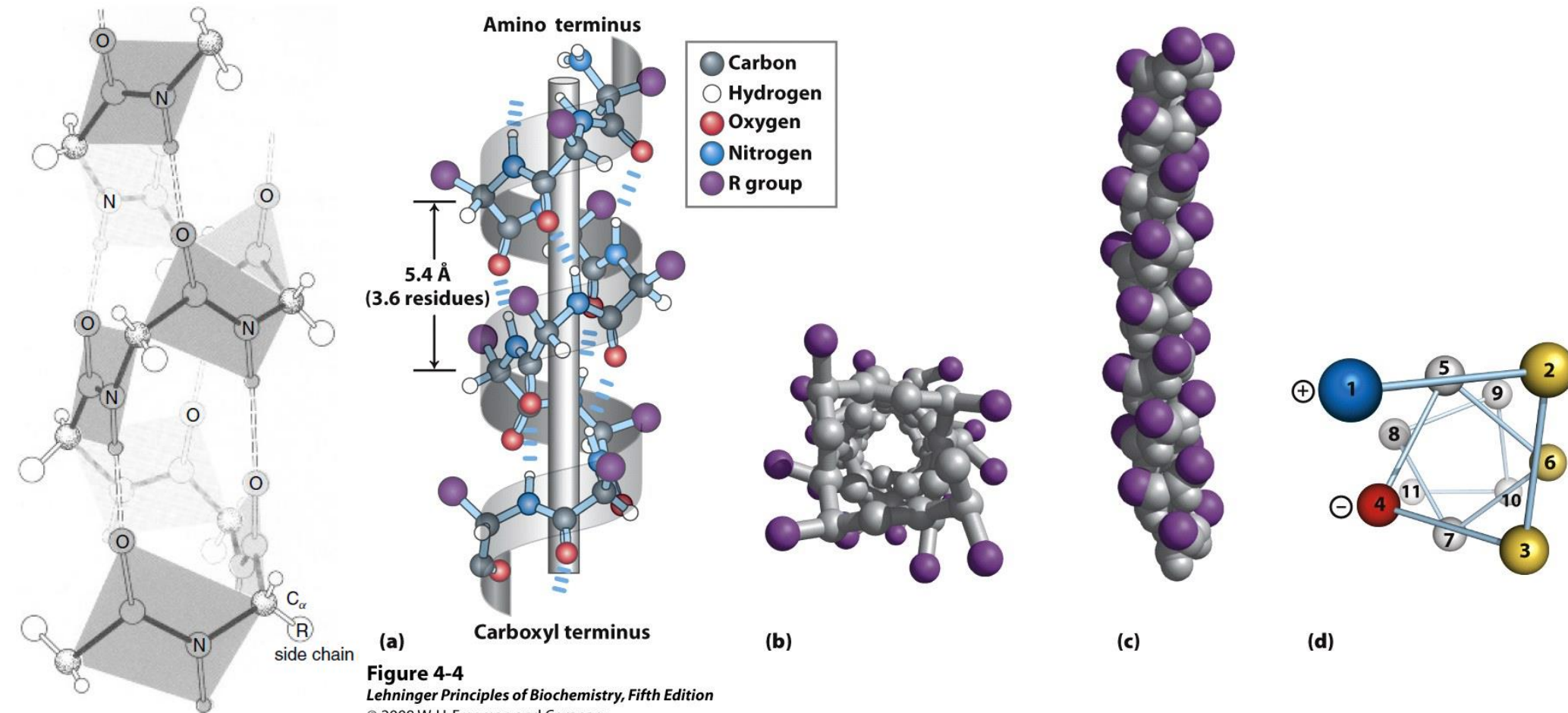


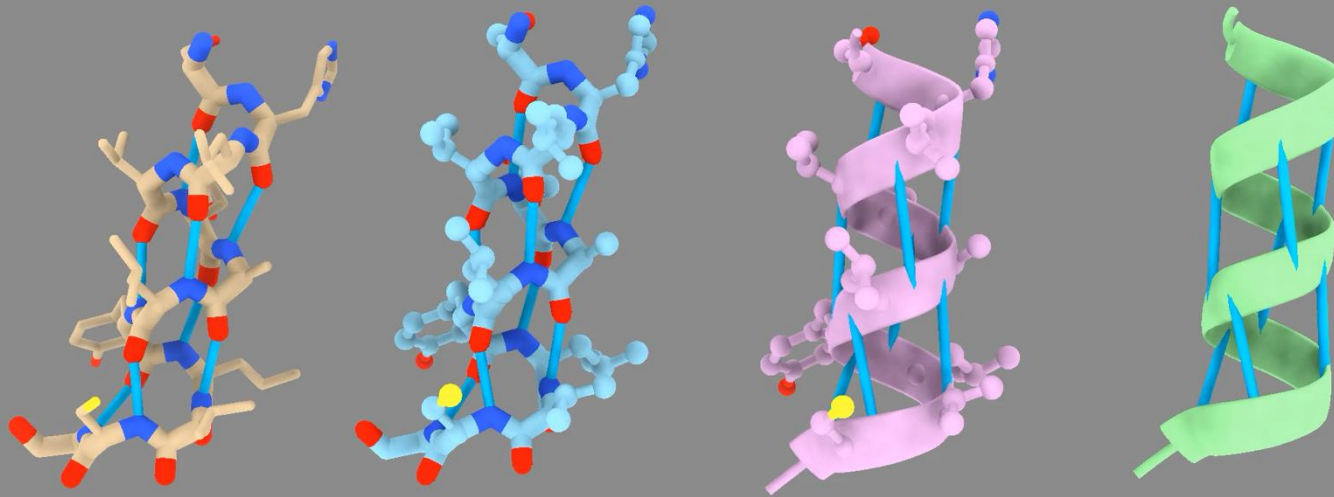
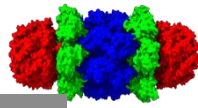
Linus Pauling, Robert Corey și Herman Branson în 1951

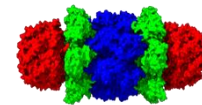




α -helixul peptidic poate fi imaginat ca un cilindru, **radicalii R fiind orientați către exterior.**







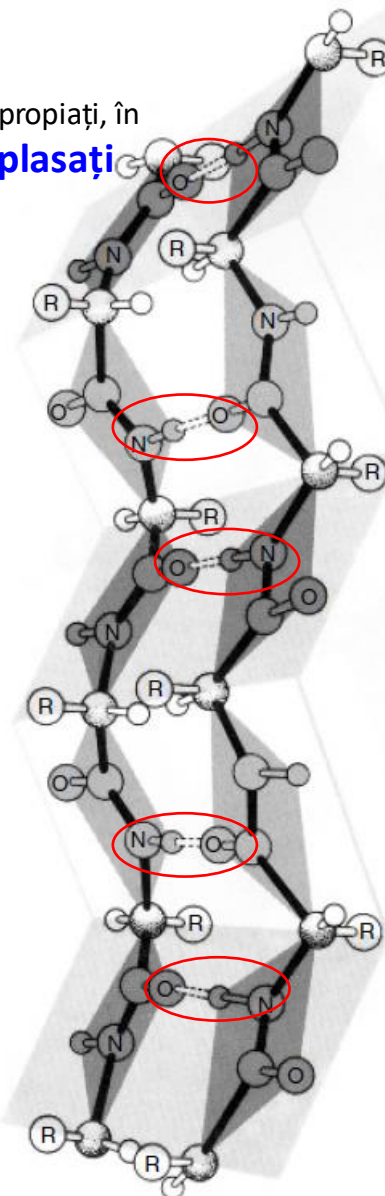
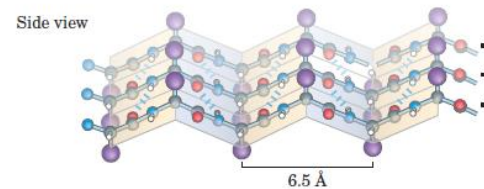
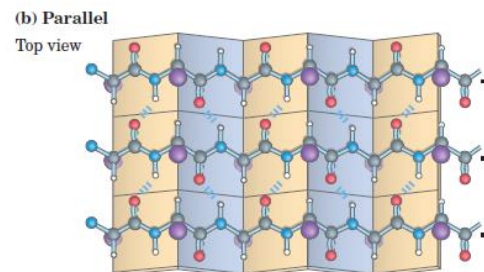
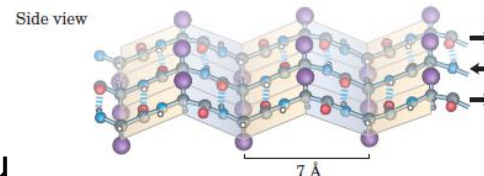
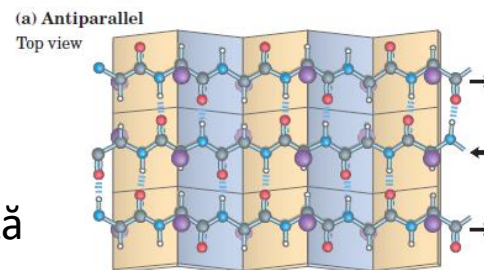
Structura β -pliată (β -sheets)

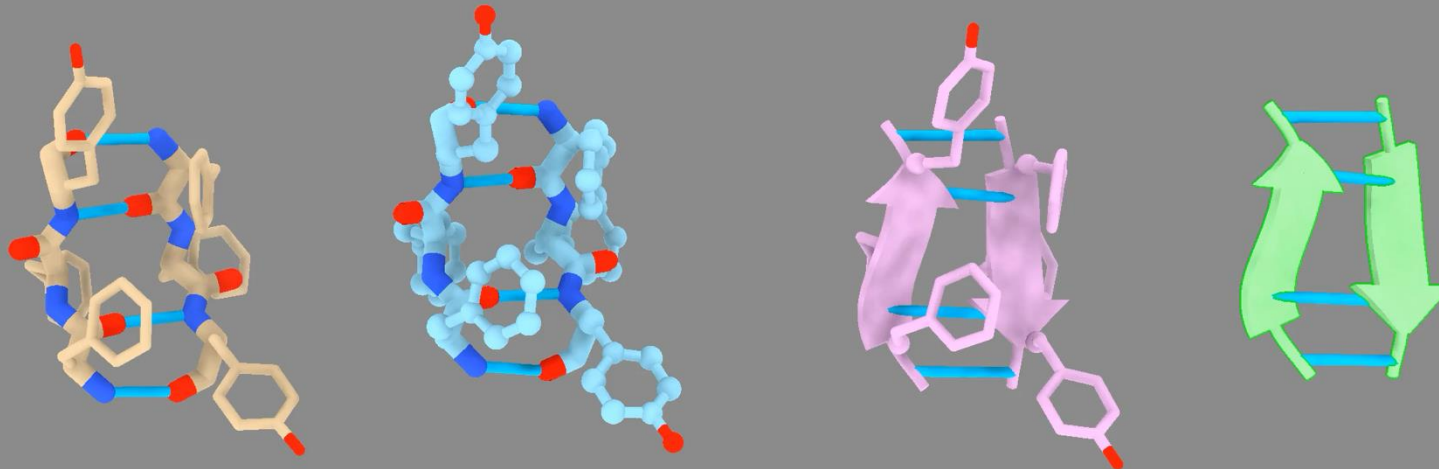
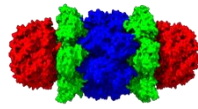
Dacă în cadrul structurilor helicale legăturile de hidrogen se formează în cadrul aceluiași schelet peptidic între aminoacizi apropiați, în cazul structurilor β -pliate **legăturile de H se stabilesc între NH și CO ai resturilor de aminoacizi amplasați fie pe catene diferite sau fie pe aceeași catenă dar la distanțe mari unul pe de celălalt.**

Funcție de direcția celor 2 catene diferite (sau porțiunile îndepărtate ale aceleiași catene) ce formează o zonă β -pliată s-au descris structuri β -pliate:

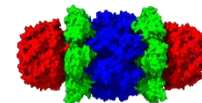
- Antiparalele** – o catena are orientarea N-C și cealaltă C-N, un pliu are 7 Å;
- Paralele** – ambele catene au aceeași orientare, un pliu are 6,5 Å;
- Mixte** - ambele tipuri de orientări, apar extrem de rar.

Structura β -pliată pot fi imaginată ca o foaie pliată, Radicalii R fiind orientati alternativ către partea superioară și inferioară a planului foi.





Structura terțiară a proteinelor



c. Structura terțiară se definește ca structura tridimensională globală a unei catene polipeptidice.

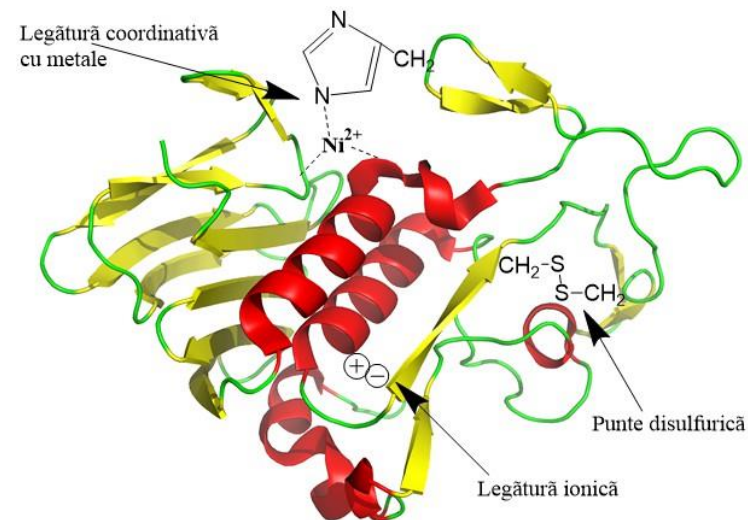
- aranjarea, pliarea și înfășurarea segmentelor α -helicoidale și β -pliate pentru a forma structura spațială tridimensională complexă a proteinei per ansamblu.

Interacțiuni implicate în realizarea structurii terțiare:

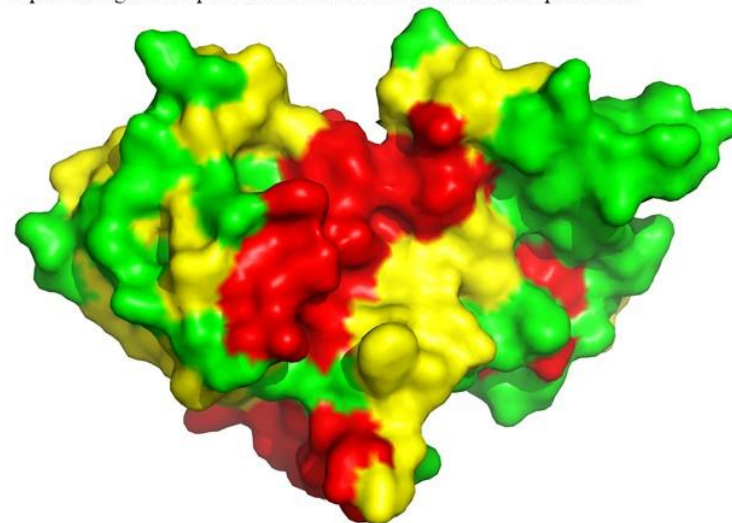
- **Legăturile de H dintre resturile de aminoacizi** - au rol secundar și au importanță doar în acele zone ce nu sunt α -helicale, β -pliate sau ce formează bucle;

- **Interacțiunile dintre catenele laterale R ale aminoacizilor** - sunt esențiale în realizarea structurii terțiare. Amplasarea lor spre exteriorul α -helix-ului și perpendicular pe planul structurii β -pliate expune catenele laterale R și permite interacțiunea acestora. Aceste interacțiuni pot fi:

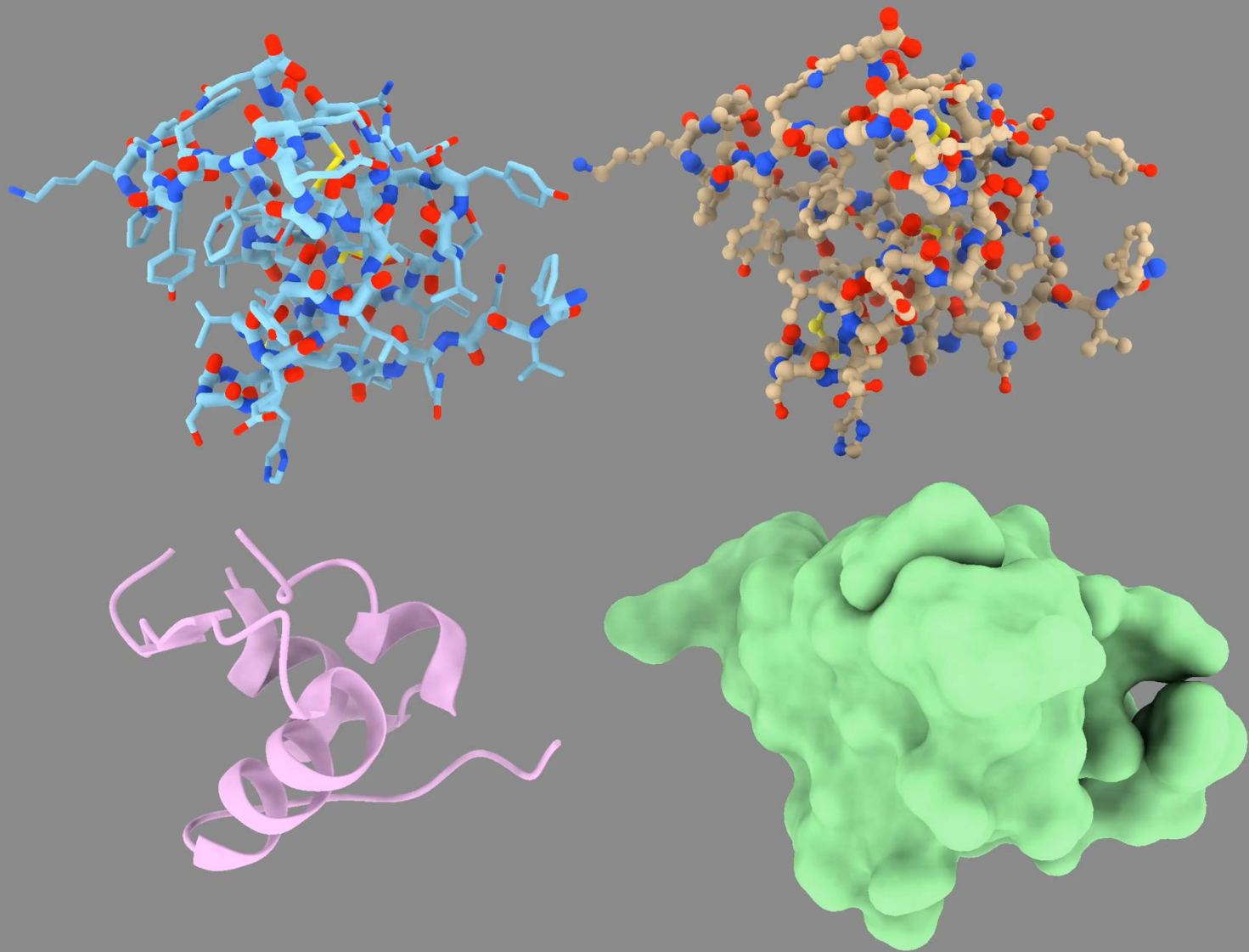
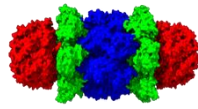
- legături de H** - între R aparținând la aminoacizi diferiți;
- interacțiunile hidrofobe** - critice pentru realizarea structurii terțiare - aminoacizii hidrofobi se vor grupa într-un **centru hidrofob**, departe de interacțiunile cu apa. Aminoacizii hidrofili se vor amplasa la exteriorul moleculei proteice;
- interacțiuni ionice** - între doi aminoacizi încărcăți electric cu sarcini opuse (**ion pair** or **salt bridge**)
- legături covalente** - un singur aminoacid poate realiza legături covalente: Cys. Legătura formată între 2 resturi de C - legătură disulfidică (S-S). Nu toate resturile de C dintr-o proteină sunt implicate în formarea de legături disulfidice;
- interacțiuni cu molecule neproteice** - metale, grupe prostetice.

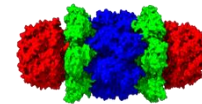


Tipuri de legături implicate în formarea structurii terțiare a proteinelor



Diverse reprezentări ale unei peptide – un fragment din insulină





D. **Structura cuaternară** reprezintă nivelul de organizare structurală cel mai înalt și este specifică unor proteine numite **proteine multimerice**. Aceste proteine conțin două sau mai multe lanțuri polipeptidice numite **subunități proteice sau protomeri**, fiecare cu structura sa primară, secundară și terțiară specifice. Protomerii se asociază necovalent pentru a forma un conglomerat spațial complex – proteină multimeră. Asocierea protomerilor este stabilă datorită interacțiunilor dintre radicalii R ai aminoacizilor aflați în zone de contact dintre protomeri și pot fi: legături de hidrogen, legături S-S sau interacțiuni hidrofobe.

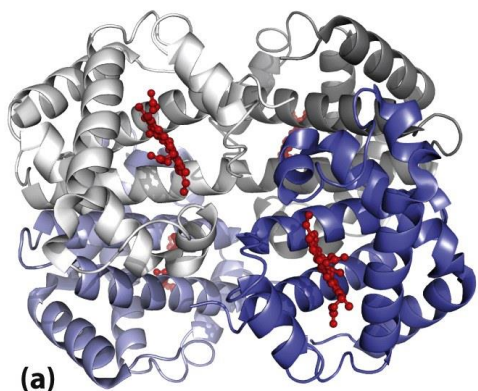
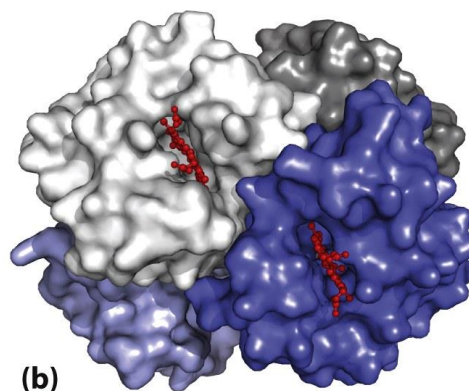


Figure 4-22
Lehninger Principles of Biochemistry, Fifth Edition
© 2008 W. H. Freeman and Company



Max Perutz, 1914–2002 (left)
John Kendrew, 1917–1997 (right)
Unnumbered 4 p138
Lehninger Principles of Biochemistry, Fifth Edition
© 2008 W. H. Freeman and Company

Un exemplu de proteină multimeră este **hemoglobina**. Aceasta conține 4 catene polipeptidice, identice două câte două și numite **catene α** (conțin 141 de aminoacizi fiecare, de culoare gri în figura de mai sus) și **β** (146 aminoacizi fiecare, albastru în figură). Hemoglobina are o structură simetrică, o catenă α interacționează cu o catenă β , astfel încât despre hemoglobină se spune că este un **tetramer** sau un **dimer de protomeri $\alpha\beta$** . Suplimentar, hemoglobina conține și componente neproteice – 4 atomi de Fe^{2+} (Fe feros) în centrul unei molecule de hem.

Hemoglobina este prima proteină multimeră a cărei structură a fost stabilită experimental – M. Perutz și J. Kendrew.

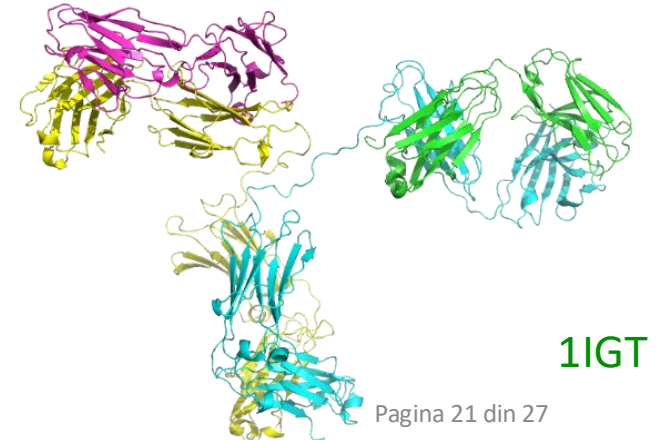
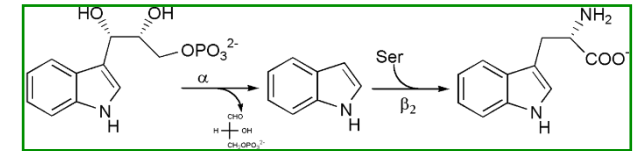
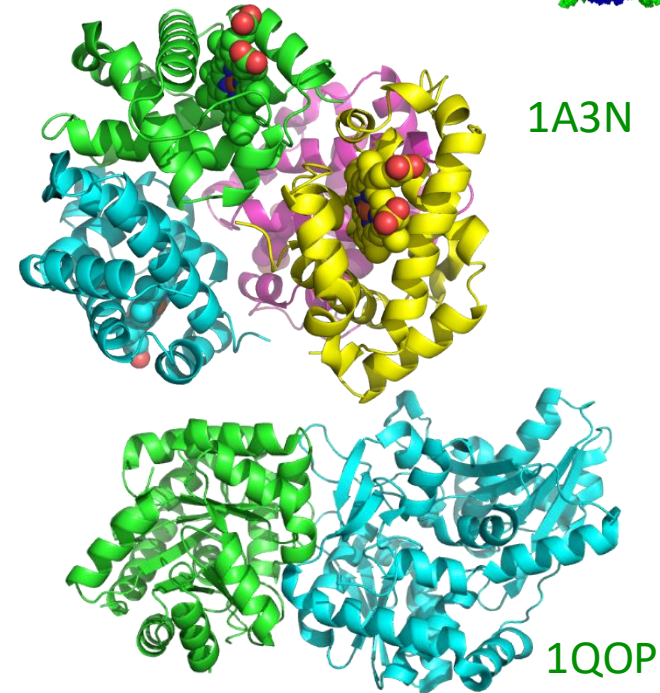
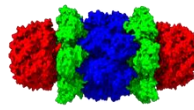
Structura cuaternară a proteinelor

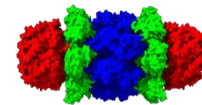
1. **Cooperarea în realizarea unei funcții.** Asocierea unor subunități ce au capacitatea de a lega un substrat duce la creșterea afinității proteinei pentru substrat peste afinitatea unui singur protomer; Ex: Hemoglobina;

2. **Co-localizarea unor funcții.** Două subunități cu funcții diferite se pot asocia astfel cele două funcții vor fi realizate de aceeași proteină. Cel mai frecvent aceste funcții sunt legate de etape diferite de procesare a unui substrat; Ex: Triptofan sintaza;

3. **Modificarea unei funcții.** Funcția unei proteine se poate modifica funcție de tipul de subunitate legată; Ex: Imunoglobulinele;

4. **Realizarea unor structuri moleculare de dimensiuni mari.** Ex: actina și miozina, microfilamentele de actină, microtubulii, filamentele intermediare;

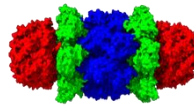




Oricare ar fi funcția sa specifică (**rolurile proteinelor au fost detaliate în cursul anterior**), pentru a o îndeplini **orice proteină trebuie să interacționeze cu alte molecule**. Interacțiunea se realizează prin formarea permanentă sau temporară de legături chimice (legături de H, coordinative, ionice, interacțiuni hidrofobe sau Van der Waals) între catenele laterale R ale aminoacizilor din structura proteică și atomii moleculei cu care proteina interacționează.

Interacțiunile dintre o proteină și altă moleculă pot fi de 2 tipuri:

1. **interacțiuni în urma căror structura sau conformația moleculei nu sunt alterate.** Aceste interacțiuni pot fi sau nu temporare și sunt extrem de importante din punct de vedere biochimic. Dacă interacțiunile sunt **tranzitorii** (temporare), molecula cu care o proteina interacționează reversibil se numește **ligand** (**termenul nu trebuie confundat cu ligandul din combinațiile complexe**). Dacă interacțiunile sunt **permanente**, molecula cu care o proteina interacționează reversibil se numește **grupare prostetică**. Zona specifică în care o moleculă se leagă de o proteină se numește **situs de legare**.
2. **interacțiuni în urma căror structura sau conformația moleculei este alterată.** (Ex. alcoolul etilic este transformat în aldehidă acetică printr-o reacție de dehidrogenare). În acest caz molecula proteică funcționează ca un bio-catalizator și poartă numele de **enzimă**, iar molecula ce suferă o **reacție enzimatică** se numește **substrat enzimatic**. Zona specifică în care substratul enzimatic se leagă de enzimă și suferă transformarea se numește **situs catalitic**.



În situsul de legare sau situsul catalitic sunt amplasați acei aminoacizi din structura proteinei ce au grupările funcționale necesare pentru a interacționa cu ligandul sau substratul enzimatic. Mai mult decât atât, acești aminoacizi au o amplasare în spațiu bine definită în așa fel încât **situsul de legare sau cel catalitic** să fie **perfect complementar ca formă și proprietăți cu ligandul, respectiv substratul enzimatic**. Acest lucru face ca interacțiunea dintre moleculele proteice și alte molecule să fie extrem de specifice.

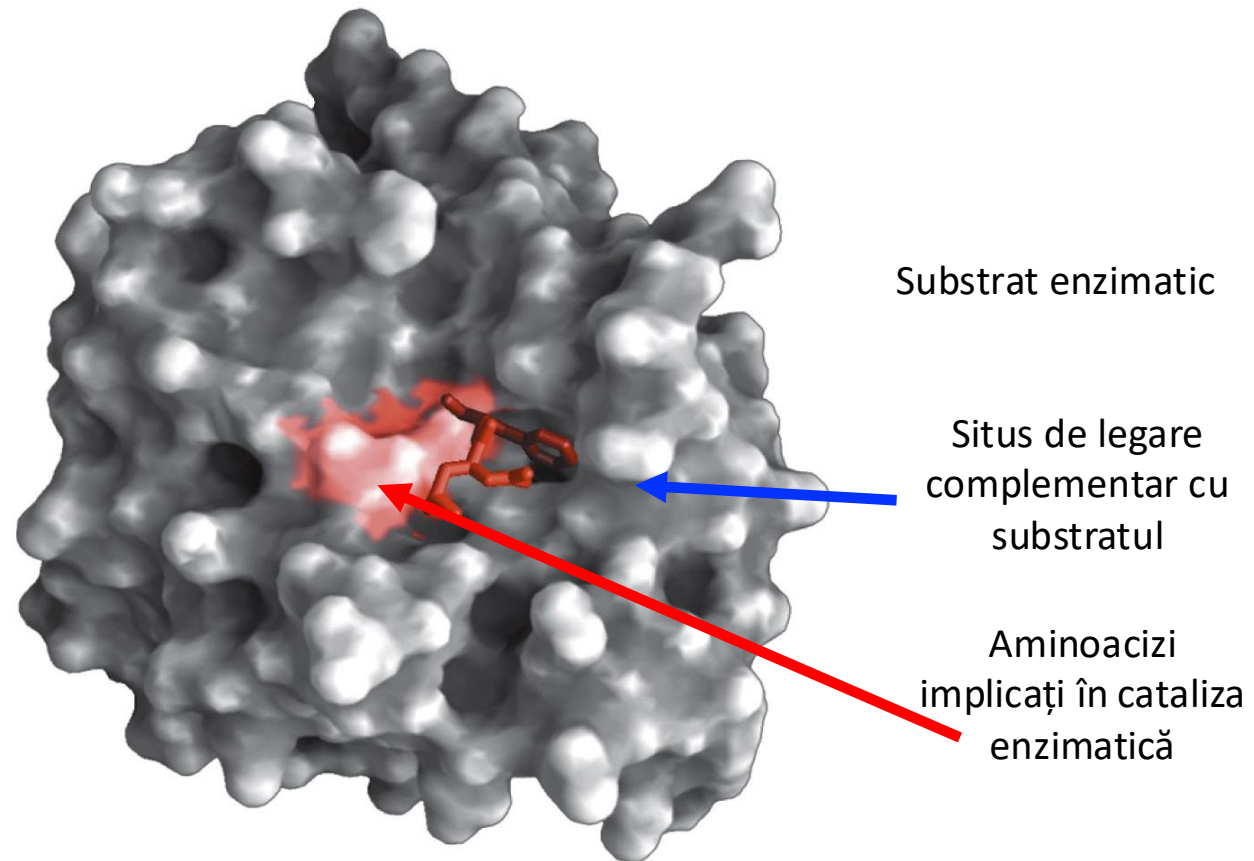
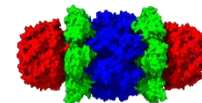


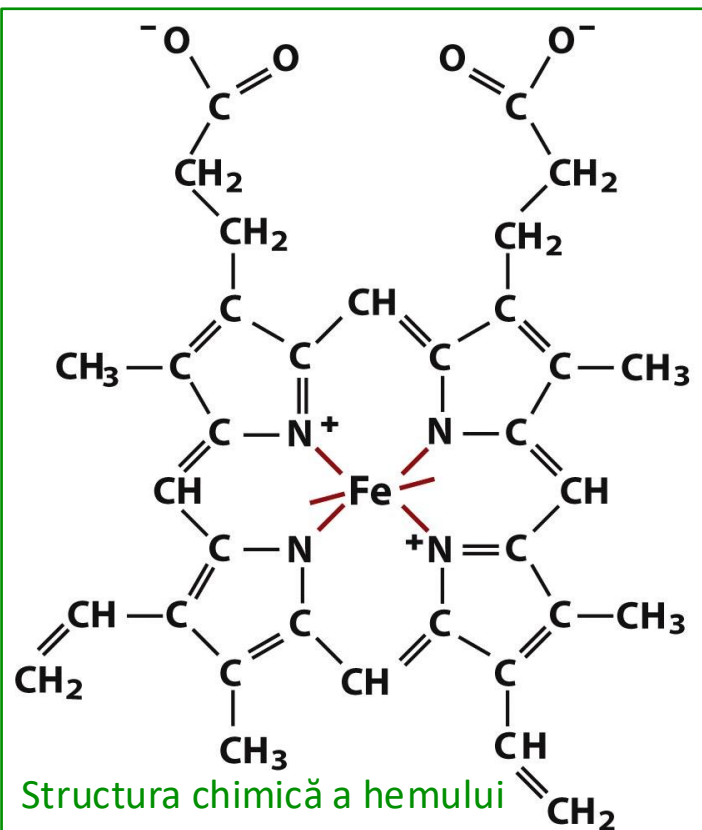
Figure 6-1
Lehninger Principles of Biochemistry, Fifth Edition
© 2008 W. H. Freeman and Company



Interacțiuni în urma căror **structura** sau **conformația moleculei** legate nu sunt alterate:

Legarea O_2 de Hemoglobină

Datorită faptului că O_2 este o moleculă nepolară, **solubilitatea sa în H_2O este relativ redusă** astfel încât cantitatea dizolvată în plasma sanguină nu este suficientă pentru funcționarea țesuturilor. De aceea **organismele multicelulare și-au creat mecanisme de transport** al acestui gaz sub forma unor proteine specifice, precum **hemoglobina (Hb)**.

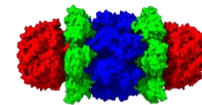


Structura chimică a hemului

Figure 5-1b
Lehninger Principles of Biochemistry, Fifth Edition
© 2008 W.H. Freeman and Company

Nici unul însă din aminoacizii proteinogeni nu este capabil să interacționeze cu O_2 . Unele metale tranziționale precum Fe sau Cu au capacitatea interacționa puternic cu O_2 prin formarea de legături coordinative, însă duc la formare de compuși periculoși (**ioni superoxid sau apă oxigenată ce afectează moleculele de ADN**). Pentru a rezolva această problemă, în proteinele ce transportă O_2 folosind Fe^{2+} , metalul este chelat de ligandul **protoporfirină** ce îi reduce activitatea. **Fe^{2+} împreună cu protoporfirina formează gruparea prostetică numită hem**. În molecula tetramerică de hemoglobină există 4 molecule de hem câte una pentru fiecare dintre cele 2 subunități α și β .

Exemple de interacțiuni realizate de proteine



Fe feros (Fe^{2+}) are o geometrie octaedrală și deci poate forma 6 legături coordinative. Patru dintre acestea sunt saturate de către 4 inele porfirinice, însă cele 2 legături perpendiculare pe planul protoporfirinei rămân libere și ar putea reacționa cu O_2 , acest lucru ducând la reducerea Fe^{2+} (Fe feros) la Fe^{3+} (Fe feric). Fe^{3+} însă nu poate lega O_2 , și deci hem-ul nu și-ar putea îndeplini funcția.

În Hb, aminoacidul histidină dintre structura uneia dintre subunități este amplasat în spațiu în așa fel încât să satureze cea de-a 5-a legătură coordinativă pe care o poate forma Fe^{2+} și o blochează.

Transformarea $\text{Fe}^{2+} \rightarrow \text{Fe}^{3+}$ nu mai este posibilă, iar hem-ul poate lega O_2 prin intermediul celei de-a 6 coordinații. Fiecare moleculă de hem leagă câte o moleculă de O_2 . În alveolele pulmonare unde concentrația de O_2 este mare, echilibrul reacției de legare este orientat spre formarea complexului HbHemO_2 , iar în țesuturi concentrația O_2 scade, astfel încât echilibrul reacției de legare este orientat spre desfacerea complexului și obținerea de HbHem și O_2 .

23.02.2026

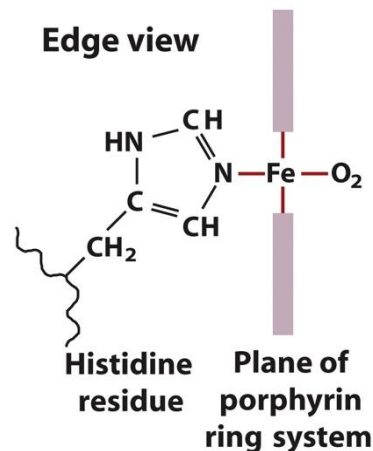


Figure 5-2
Lehninger Principles of Biochemistry, Fifth Edition
© 2008 W. H. Freeman and Company

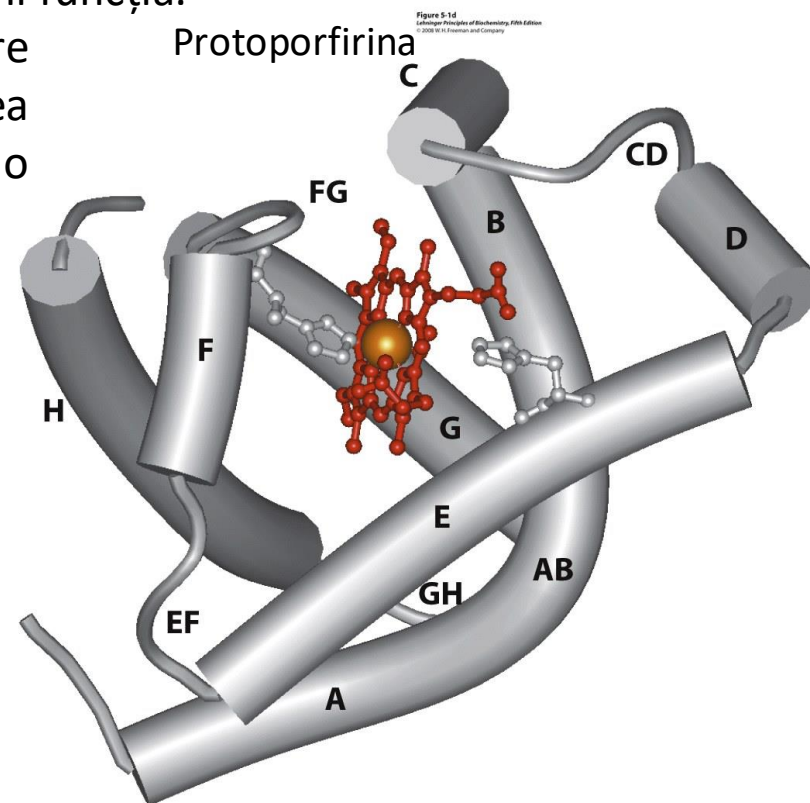
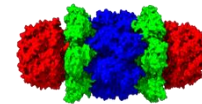


Figure 5-3
Lehninger Principles of Biochemistry, Fifth Edition
© 2008 W. H. Freeman and Company

Exemple de interacțiuni realizate de proteine



Interacțiuni în urma căror **structura** sau **conformația** moleculei legate **sunt** alterate:

Reacția de hidroliză ca catalizată de chimiotripsină

Enzima chimiotripsină este o proteină ce catalizează hidroliza legăturilor peptidice din apropierea unor aminoacizi ce conțin nuclee aromatice precum triptofanul, fenilalanina sau tirozina. Forma buzunarului în care se află **situsul catalitic** este complementară cu o serie de peptide ce conțin acești aminoacizi. În situsul catalitic există aminoacidul **Serină** amplasat în așa fel încât gruparea sa **hidroxil** să poată realiza o reacție de acilare cu peptida prin care legătura peptidică se rupe. Printr-o reacție de de-acilare cu apa, gruparea OH este refăcută și enzima poate să participe la o nouă reacție.

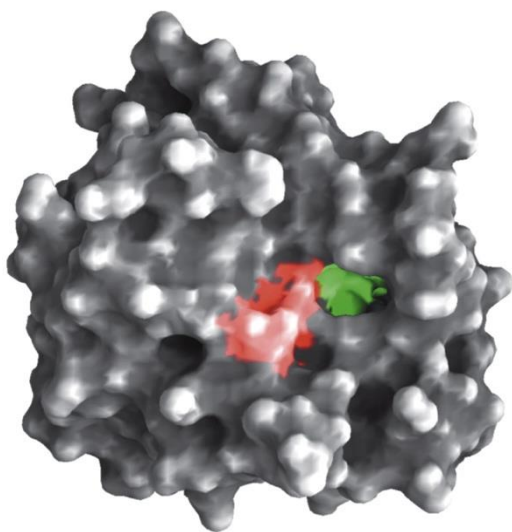


Figure 6-18b
Lehninger Principles of Biochemistry, Fifth Edition
© 2008 W. H. Freeman and Company

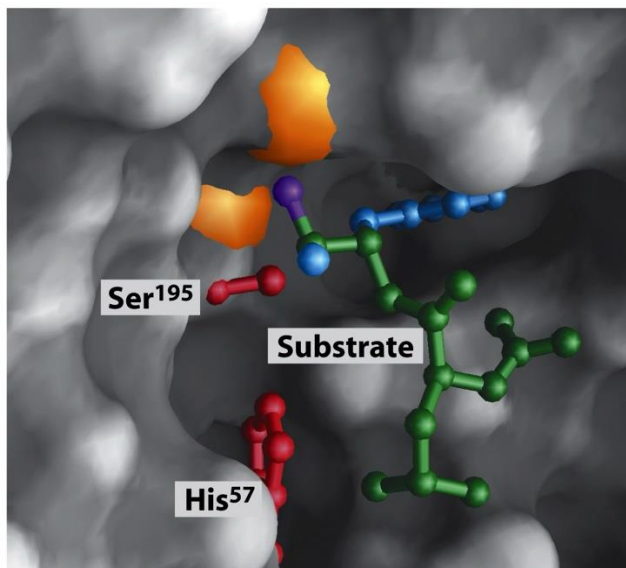
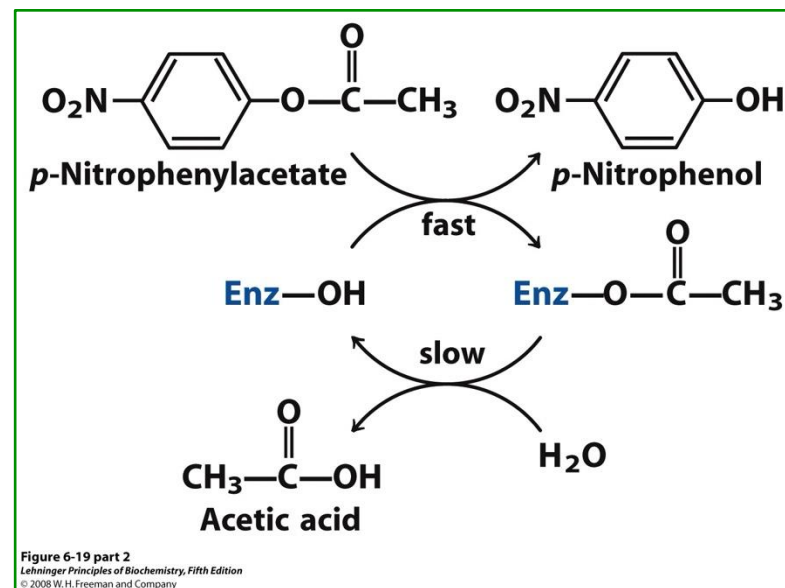
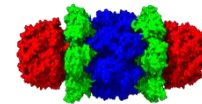


Figure 6-18d
Lehninger Principles of Biochemistry, Fifth Edition
© 2008 W. H. Freeman and Company



Mecanismul de reacție al chimiotripsinei cu analogul p-nitrofenilacetat

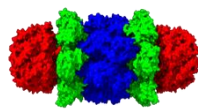


Cu câteva excepții, toate **enzimele ce catalizează reacțiile biochimice în organismele vii sunt proteine** (**Care sunt excepțiile?**). Reacțiile chimice catalizate de enzime au ca suport material catenele laterale ale unor aminoacizi cheie amplasați în **situsul catalitic** numiți **aminoacizi catalitici**. Activitatea catalitică a enzimelor depinde de structura tridimensională a situsului catalitic și de amplasarea optimă a aminoacizilor catalitici, deci de structura nativă a catenei polipeptidice pe ansamblu. Dacă aceasta este afectată (**ex. prin încălzire proteinele sunt denaturate – albumina din ou**), activitatea enzimatică dispare.

Însă, numărul de radicali disponibili pe catenele laterale ale aminoacizilor este limitat și nu este suficient pentru a putea realiza toate reacțiile biochimice necesare pentru a funcționa o celulă. De aceea, unele enzime conțin suplimentar în structura lor o moleculă ne-proteică ce participă la procesul catalitic și care este numită:

- 1. cofactor enzimatic** – orice moleculă neproteică legată necovalent de proteină. Poate fi un atom metalic (Ex: Fe^{2+} , Mg^{2+} , Mn^{2+} , Zn^{2+}) sau o moleculă organică cu sau fără atomi metalici adică o:
- 2. coenzimă** - cofactor enzimatic de natură organică cu sau fără atomi metalici;
- 3. grupare prostetică** – dacă molecula este legată printr-o legătură covalentă de molecula proteică.

Enzima completă, activă din punct de vedere catalitic se numește **holoenzimă** și este alcătuită din partea proteică numită **apoenzimă (apoproteină)** și cofactor/coenzimă/grupă prostetică după caz.



Bază de date cu structuri proteice disponibilă la adresa:
<http://www.rcsb.org/pdb/home/home.do>

Peste 159000 de structuri proteice, pentru fiecare proteină fiind prezentate:

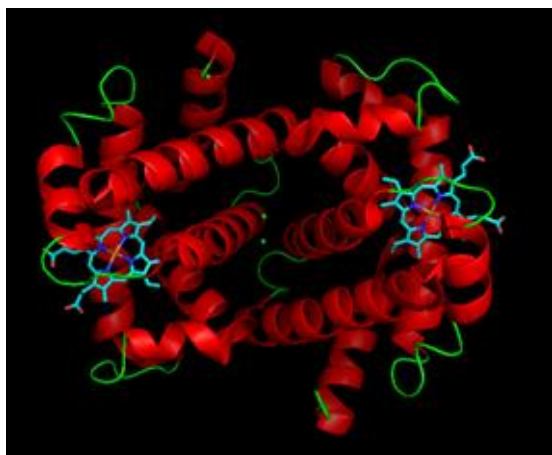
- 1. un cod de identificare unic (PDBID) alcătuit din 4 litere
- 2. referința bibliografică unde a fost descrisă acea structură
- 3. data la care structura a fost publicată în PDB
- 4. metoda prin care a fost stabilită structura: difracție cu raze X, NMR sau microscopie electronică
- 5. numărul de aminoacizi și eventualii leiganzi non-proteici (cofactor, metale, etc)
- 6. un fișier .pdb care conține pozițiile în spațiu a tuturor atomilor din structura moleculei

Hemoglobina - PDBID **2DHB**

ATOM	1	N	VAL	A	1	7.744	19.404	6.879	1.00	0.00	N
ATOM	2	CA	VAL	A	1	7.616	19.012	5.452	1.00	0.00	C
ATOM	3	C	VAL	A	1	9.070	18.660	5.064	1.00	0.00	C
ATOM	4	O	VAL	A	1	9.520	17.555	3.442	1.00	0.00	O
ATOM	5	CB	VAL	A	1	6.895	20.047	4.503	1.00	0.00	C
ATOM	6	CG1	VAL	A	1	6.250	19.382	3.284	1.00	0.00	C
ATOM	7	CG2	VAL	A	1	5.879	21.901	5.149	1.00	0.00	C
ATOM	8	N	LEU	A	2	9.832	19.736	4.849	1.00	0.00	N
ATOM	9	CA	LEU	A	2	11.285	19.835	4.679	1.00	0.00	C
ATOM	10	C	LEU	A	2	11.762	21.945	5.487	1.00	0.00	C
ATOM	11	O	LEU	A	2	11.194	22.153	5.350	1.00	0.00	O
ATOM	12	CB	LEU	A	2	11.749	19.807	3.199	1.00	0.00	C
ATOM	13	CG	LEU	A	2	12.143	18.420	2.016	1.00	0.00	C
ATOM	14	CD1	LEU	A	2	11.169	17.261	2.832	1.00	0.00	C
ATOM	15	CD2	LEU	A	2	12.402	18.507	1.135	1.00	0.00	C
ATOM	16	N	SER	A	3	12.387	20.607	6.601	1.00	0.00	N
ATOM	17	CA	SER	A	3	13.208	21.544	7.403	1.00	0.00	C
ATOM	18	C	SER	A	3	14.478	22.011	8.720	1.00	0.00	C
ATOM	19	O	SER	A	3	14.608	21.521	5.501	1.00	0.00	O
ATOM	20	CB	SER	A	3	13.548	20.738	8.754	1.00	0.00	C
ATOM	21	OG	SER	A	3	13.995	19.349	8.404	1.00	0.00	O
ATOM	22	N	ALA	A	4	14.985	23.194	7.007	1.00	0.00	N
ATOM	23	CA	ALA	A	4	16.300	23.755	8.593	1.00	0.00	C
ATOM	24	C	ALA	A	4	17.400	22.878	6.385	1.00	0.00	C
ATOM	25	O	ALA	A	4	17.502	22.220	5.219	1.00	0.00	O
ATOM	26	CB	ALA	A	4	16.793	24.905	7.405	1.00	0.00	C
ATOM	27	N	ALA	A	5	17.414	21.865	7.449	1.00	0.00	N
ATOM	28	CA	ALA	A	5	18.113	20.600	7.772	1.00	0.00	C
ATOM	29	C	ALA	A	5	17.788	19.415	6.804	1.00	0.00	C
ATOM	30	O	ALA	A	5	18.502	18.389	6.854	1.00	0.00	O
ATOM	31	CB	ALA	A	5	17.678	20.260	9.204	1.00	0.00	C
ATOM	32	N	ASP	A	6	16.577	19.491	6.261	1.00	0.00	N
ATOM	33	CA	ASP	A	6	16.023	18.620	5.203	1.00	0.00	C
ATOM	34	C	ASP	A	6	16.425	18.938	3.778	1.00	0.00	O
ATOM	35	O	ASP	A	6	17.476	18.335	3.472	1.00	0.00	O

Fișierul 2DHB vizualizat în pyMol

<https://pymol.org/>



Modelul 2D derivat din 2DHB și fabricat prin imprimare 3D

<https://modele moleculare.ro/>

