

Уургийн β -эргэлт төрлийн хоёрдогч бүтцийн структурийн биоинформарикийн судалгаа

Д. БАТХИШИГ¹, П.ЭНХБАЯР², Н.АЛТАНГЭРЭЛ¹, Д.МӨНХ-ЭРДЭНЭ¹.

¹Монгол Улсын Боловсролын Их Сургууль, Физик Технологийн Сургууль, Электроник-Мэдээлэл Технологийн Тэнхим.

²Монгол Улсын Их Сургууль, Биологийн факултет, Биофизикийн тэнхим.

Товчлол

Уурагт α -спираль, β -багц ба эргэлт гэсэн хоёрдогч бүтцүүд байх ба эдгээр хоёрдогч бүтэц нь амин хүчлийн дарааллын үндсэн хэлхээ нь устөрөгчийн холбоосоор тогтворждог[1]. α -, β -, γ -төрлийн эргэлтүүд байх бөгөөд бид энэ судалгаандаа β -эргэлт төрлийг сонгон авлаа.

Энэ судалгааны ажлын хүрээнд 18 уургийн 3 хэмжээст орон зайн бүтцийн мэдээлэлийг уургийн өгөгдлийн сангаас авч, DSSP программаар хоёрдогч бүтцийн тооцоолол хийж β -эргэлтүүдийн голын хоёр аминхүчлийн ϕ, ψ өнцгүүдийг Matlab дээр бичсэн программаар тодорхойлон ангилалт хийв. Эдгээр β -эргэлтийн нэг эргэлтэд оногдох спиральн тэнхлэг дагуух шилжилт буюу алхам (P), нэг эргэлтэд оногдох амин хүчлийн тоо (n), спиральн радиус (r), идеаль спиралиас гажилтын алдаа $p = \text{RMSD}/\sqrt{N-1}$ зэрэг спиральн параметруудийг HELFIT программын тусламжтайгаар тодорхойлсон.

Түлхүүр үгс: α -хеликс, β -багц, β -эргэлт, DSSP, HELFIT.

Оршил

Аливаа амьд бие оршин тогтнох үндэс нэгж болох эсийн бүтэц үйл ажилгаанд уураг заавал оролцдог байна [12]. Иймд уургийн шинж чанар, бүтэц, үйл ажилгааг зайлшгүй судалж мэдэх шаардлагатай. Уургийн хоёрдогч бүтцийн элементүүдийг нэгэн утгатайгаар тодорхойлох нь уургийн ангилал, уургийн домений бүтэц-үүргийг тодорхойлох, гуравдагч бүтцийн тооцоо хийх, уураг-лигандийн харилцан үйлчлэлийг тодорхойлох, уургийн дизайн хийхэд чухал шаардлагатай анхны алхам юм.

Уургийн хоёрдогч бүтцийн нэг орон зайн зохион байгуулалт нь альфа-спираль (α -helix) ерөнхий хэлбэр нь мушигралдсан ороодос буюу спираль хэлбэртэй байдаг. Ийм хэлбэртэй тогтвортой оршиход устөрөгчийн холбоос чухал үүрэг гүйцэтгэнэ [1].

Уургийн хоёрдогч бүтцийн дараагчийн нэг байгууламж бол β -багц юм. Зэргэлдээ орших β -гинжнүүд устөрөгчийн холбоосоор холбогдон β -багцыг бүрдүүлдэг. Харин β -гинж нь ойролцоогоор 5-10 амин хүчлүүд пептидын холбоосоор холбогдон сунаж тогтсон байдаг [2].

Судалгааны материал, арга зүй

Энэ судалгааны ажлын хүрээнд 18 уургийн 3 хэмжээст орон зайн бүтцийн мэдээлэлийг уургийн өгөгдлийн сангаас авч, DSSP программаар хоёрдогч бүтцийн тооцоолол хийж β -эргэлтүүдийн голын хоёр аминхүчлийн ϕ, ψ өнцгүүдийг Matlab дээр бичсэн программаар тодорхойлон ангилалт хийв. Эдгээр β -эргэлтийн нэг эргэлтэд оногдох спиралийн тэнхлэг дагуух шилжилт буюу алхам (P), нэг эргэлтэд оногдох амин хүчлийн тоо (n), спиралийн радиус (r), идеаль спиралиас гажилтын алдаа $p = \text{RMSD}/\sqrt{N-1}$ зэрэг спиралийн параметруудийг HELFIT программын тусламжтайгаар тодорхойллоо [11].

DSSP программ

DSSP программ нь уургийн хоёрдогч бүтцийн тооцоог уургийн өгөгдлийн сангийн файлаас тодорхойлдог [2].

Устөрөгчийн холбоос нь цахилгаан сөрөг чанар ихтэй атомтай холбогдсон устөрөгчийн атомын чөлөөт орбитал нь өөр нэг атомын холбогдоогүй хос электрон бүхий орбиталтай харилцан үйлчлэлцэнэ. Устөрөгчийн холбоосыг тухайн функциональ бүлэг атомуудын цахилгаан шинж чанарыг ашиглаж тогтоох бөгөөд түүний энергийг дараах хэлбэрээр илэрхийлдэг [8].

$$E = q_1 q_2 \left(\frac{1}{r} (ON) + \frac{1}{r} (CH) - \frac{1}{r} (OH) + \frac{1}{r} (CN) \right) * f \quad (1.1)$$

$$q_1 = -0.42e \quad \tilde{N} = O; \quad q_2 = 0.20e \quad N - H; \quad f = 322 \text{ \AA}^2 \text{ e}^2 / \text{e}^2 \text{ i} \ddot{v} \quad (1.2)$$

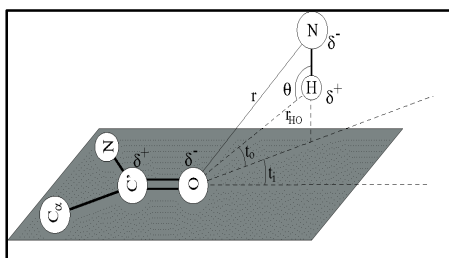
E -харилцан үйлчлэлийн энерги

r -хоёр атомын хоорондох зай

e -эгэл цэнэгийн хэмжээ

f -туршилтын болон тооцоололын үр дүнгийн хоорондох зөрүүг арилгах коэффициент

Уураг дахь устөрөгчийн холбоосын энерги $E < -0.5 \text{ kcal/mol}$ байх ба харьцангуй сул харилцан үйлчлэл юм. Хамгийн тохиромжтой буюу уургийн хувьд тогтвортой төлөвийн устөрөгчийн холбоосын энерги нь $E = -3 \text{ kcal/mol}$. Энэ холбоосын энерги нь атомуудын цахилгаан шинж чанараас хамаарахаас гадна $N-H \cdots O$ атомуудын хооронд үүсэх өнцгөөс хамаардаг.



Зураг №1: Уураг дахь устөрөгчийн холоос

HELFIT программ

Хамгийн бага квадратын аргаар тасралтгүй үргэлжилсэн спиралийн 5 параметруудийг тодорхойлдог.

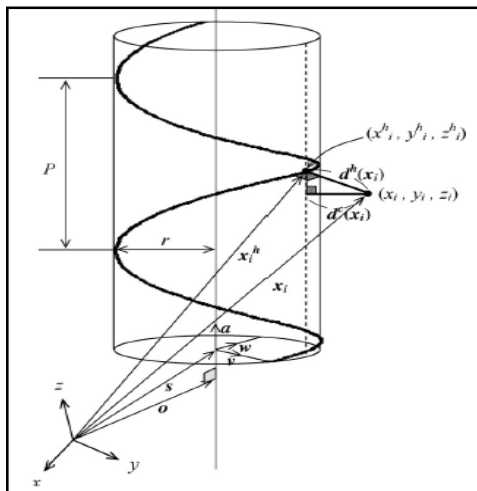
1. Тэнхлэгийн нэгж вектор $(\vec{i}, \vec{j}, \vec{k})$
2. Спиралийн радиус r
3. Спиралийн нэг эргэлтэнд хийгдэх алхам P

HELFIT программ нь спиралийн 5 параметрийг ашиглаад хамгийн бага квадратын аргаар өндөр нарийвчлалтай тооцоолох боломжтой. Хамгийн багадаа 4 цэгийн өгөгдөл дээр дүн шинжилгээ хийх ба эдгээр цэгүүдийн өгөгдөл нь уураг дахь β -эргэлтийн Ca атомын координатууд болно [9].

Хамгийн бага квадратын арга гэдэг нь үнэлгээний утга болон бодит утгуудын зөрүүний квадратуудын нийлбэр хамгийн бага байх үед a_0, a_1 параметруудийг тодорхойлдог арга юм. d_i -ийг абсолютаар нэмбэл тэдгээрийн нийлбэр “0” болох учир квадрат зэрэгт дэвшүүлэх шаардлага зүй ёсоор гарч байна [15].

$$S = \sum_{i=1}^n d_i^2 = \sum_{i=1}^n (Y_i - \hat{Y}_i)^2 = \sum_{i=1}^n (a_0 + a_1 x_i - \hat{y}_i)^2 \quad (2.1)$$

S -min функцын экстерумыг тодорхойлох зайлшгүй нөхцөл нь түүнээс a_0, a_1 параметруудээр уламжлал аваад 0-тэнцүүлэх явдал юм.



Зураг №2: Спиралийн геометр дүрсийг байгуулсан байна. $\vec{x}_i^h = (x_i^h; y_i^h; z_i^h)$ тооллын эхээс i -р цэгт татсан вектор. $\vec{x}_i^h = (x_i^h; y_i^h; z_i^h)$ тооллын эхээс спиралийн i -р цэгт татсан вектор. $\vec{O} = (O_x; O_y; O_z)$ тооллын эхээс спиралийн тэнхлэгт перпендикуляраар татсан вектор. $\vec{S} = (S_x; S_y; S_z)$ тооллын эхээс спиралийн эхлэлийн цэгийн тэнхлэгт харгалзах цэгт татсан вектор. $\vec{a} = (a_x; a_y; a_z)$ спиралийн тэнхлэгийн дагуу чиглэлтэй вектор. \vec{v} вектор нь спиралийн тэнхлэг дагуух \vec{a} вектортой перпендикуляр спиралийн эхлэлийн цэгт татсан вектор. \vec{w} вектор нь \vec{a} болон \vec{v} векторуудтай перпендикуляр. r -спиралийн радиус. P -спиралийн нэг эргэлтэнд хийх алхамын урт [9].

1. Босоо тэнхлэгээс i -дүгээр цэг хүртлэх зайг r_i гэвэл

$$r_i = x_i - o - (x_i - a)a; \quad (2.2)$$

2. Тэгвэл i -дүгээр цэгээс цилиндр гадаргуу хүртлэх зайг d_i , r цилиндрийн радиус.

$$d_i = |r_i| - r; \quad (2.3)$$

3. d_i -ийн квадратуудын нийлбэр

$$J^c(r, a, o) = \sum d_i^2 = \sum (|r_i| - r)^2; \quad (2.4)$$

J^c функцээс параметруудээр уламжлал авах шаардлагатай.

харилцан перпендикуляр векторууд $\mathbf{a} \cdot \mathbf{o} = \mathbf{0}; |\mathbf{a}| = \mathbf{1};$

4. Спиралийн x^h цэг дараах байдлаар илэрхийлэгдэнэ.

$$\mathbf{x}^h = \mathbf{o} + \mathbf{a}Pt + \mathbf{r}(\mathbf{v} \cos t + \mathbf{w} \sin t); \quad (2.5)$$

t -спиралийн тэнхлэгээ тойрох эргэлтын өнцөг ба хувьсах хэмжигдэхүүн.

$\vec{a}, \vec{o}, \vec{v}, \vec{w}$ эдгээр нэмэлт нэгж векторууд нь харилцан перпендикуляр векторууд учраас $\mathbf{a} \cdot \mathbf{v} = \mathbf{0}, \mathbf{v} \cdot \mathbf{w} = \mathbf{0}, \mathbf{w} \cdot \mathbf{a} = \mathbf{0}$ болно.

5. Идеаль спиралиас гажилтын алдаа буюу спиралийн үнэлгээний утга (p).

Үнэлгээний утга буюу p -ийн утга хэдий их байна төдий чинээ алдаатай байна.

$$p = \sqrt{\frac{\sum_{l=1}^n d_l^2}{n-1}} \quad (2.6)$$

n -өгөгдлийн тоо

d_i -үнэлгээний утга болон бодит утга хоёрын хоорондох зөрүү

t-тест

HELFIT программаар β -эргэлтийн спиралийн геометр параметруудийг тодорхойлсон. Үр дүнгээс β -эргэлтийн I, II төрлийн спиралийн параметрууд статистикийн хувьд хоорондоо илэрхий ялгаатай хоёр зүйл болох нь тогтоогдсон. Статистикийн хувьд хоорондоо ялгаатай болохыг “t” тестээр шалгасан.

t-тест нь хоорондоо хамааралгүй хоёр зүйл ижил утгатай хэмжигдэхүүнтэй тохиолдолд хоорондоо ялгаатай эсэхийн үнэлгээ юм [15].

$$t = \frac{\bar{X} - \bar{Y}}{S_{\bar{X}\bar{Y}} \cdot \sqrt{\frac{1}{n_X} + \frac{1}{n_Y}}}; \quad (3.1)$$

$S_{\bar{X}\bar{Y}}$ —хоёр хэмжигдэхүүний стандарт хазайлтын үнэлгээ $S(\bar{I}, \bar{II})$

\bar{X} —нэг бүлгийн дундаж

\bar{Y} —нөгөө бүлгийн дундаж

$n_X n_Y$ —хэмжилтүүдийн тоо

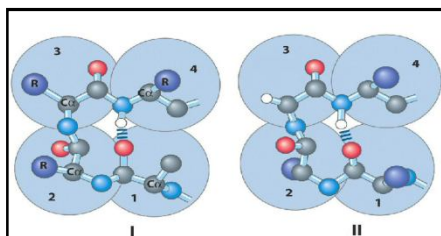
$S_{\bar{X}\bar{Y}}$ —хоёр хэмжигдэхүүний стандарт хазайлтын үнэлгээг дараах илэрхийлэлээр тодорхойлдог.

$$S_{\bar{X}\bar{Y}} = \sqrt{\frac{(n_X-1)S_X^2 + (n_Y-1)S_Y^2}{n_1 + n_2 - 2}}; \quad (3.2)$$

S_Y, S_X —стандарт алдаа;

Үр дүн ба хэлэлцүүлэг

β -эргэлт нь дөрвөн амин хүчлээс тогтсон пентапептид хэлхээ нь ойролцоогоор 180° эргэлт хийдэг. Чухамдаа энэ нь уургийн ерөнхий хэлбэрийг бараг бөмбөлөг болгоход хүрэгдэг. 1968 онд Venkatachalam уургийн бүтцийн загвар дээр судалгаа хийж β -эргэлтийг анх тогтоосон [6]. Тэрээр голын хоёр амин хүчлийн ϕ , ψ өнцөг дээр үндэслэн хоорондоо ялгаатай гурав анги байх ба $C=O(i)$ болон $N-H(i+3)$ хооронд устөрөгчийн холбоос үүсдэг ба голын хоёр амин хүчлийн $\phi(\phi)$, $\psi(\psi)$ эсрэг өнцгөө агуулсан (I',II',III') гэсэн β -эргэлт байдаг [7]. Өөрөөр хэлбэл β -эргэлтийн I-төрлийн $\phi(i+1)=-60^\circ$, $\psi(i+1)=-30^\circ$, $\phi(i+2)=-90^\circ$, $\psi(i+2)=0$ бол I'-төрлийн $\phi(i+1)=-60^\circ$, $\psi(i+1)=-30^\circ$, $\phi(i+2)=-90^\circ$, $\psi(i+2)=0$ эдгээр өнцөгүүд нь хоорондоо ойролцоогоор 180° -ийн зөрүүтэй байдаг хэмээн тодорхойлсон байна [6]. Үүний дараа 1973 онд Lewis уургийн бүтцийг 3-хэмжээст авч үзэн β -эргэлтийг ерөнхийд нь тодорхойлсон. $C\alpha(i)$ ба $C\alpha(i+3)$ хоорондох зай 7\AA -аас байна гэжээ. Эдгээр шинэ тодорхойлолтуудыг оруулаад β -эргэлтийг 10 өөр төрөлд ангилж болно. (I,I',II,II',III,III',IV,V,VI,VII) эдгээр ангилал нь зөвхөн ϕ , ψ өнцгөөр тодорхойлохгүй ба байрлал болон бусад нарийн хэмжээсүүд дээр магадлана. Харин $\phi(\phi)$, $\psi(\psi)$ өнцгөн дээр үндэслээд зөвхөн 6 өөр төрөлд ангилж болдог. 1981 онд Richardson-ний олон нэр төрлийн зүйлтэй энэ ангилалыг нийтэд хамгийн их хэрэглэдэг. β -эргэлтийг ерөнхийд нь I ба II гэсэн 2 төрөлд ангилдаг [3].



Зураг №3: β -эргэлтийн I, II төрөл

β -эргэлт нь 4 амин хүчлийн дараалалаас бүрдэнэ. Амин хүчлүүдийг байршлаар нь $i, i+1, i+2, i+3$ ингэж дугаарлана. Энэ нь спираль биш ба $C\alpha(i)$ ба $C\alpha(i+3)$ хоорондох зай 7\AA -аас бага байна. 1981 онд Richardson, 1985 онд Rose нар β -эргэлтийн $NH(i+3)-CO(i)$ гол амин хүчлийн атомуудын хоорондох устөрөгчийн холбоос нь уургийн ерөнхий хэлбэр дүрсийг байгуулдаг гэж үзсэн [3].

Дээрхи судлаачидын тодорхойлолттой энэ судалгаа тохирч байна.

Уургийн өгөгдлийн сангийн файлаас тодорхойлсон үр дүн:

		β-эргэлт I төрөл		β-эргэлт II төрөл	
		Дундаж[°]	SE [°]	Дундаж [°]	SE [°]
	Өгөгдөл	41	-	30	-
Хажуугын өнцгүүд Ca	Φ (i+1)	-62,5	+/- 1,8	-57,5	+/- 1,7
	Ψ (i+1)	-25,4	+/- 2,2	131,3	+/- 1,5
	Φ (i+2)	-93,0	+/- 2,8	87,1	+/- 2,1
	Ψ (i+2)	-2,4	+/- 2,5	-1,8	+/- 3,4
Ca(i)-Ca(i+3) зай	$d < 7\text{\AA}$	5,5Å	+/- 0,1 Å	5,7 Å	+/- 0,0 Å

Хүснэгт №1: β-эргэлтийн ф,ψ өнцөг, d зайн тодорхойлсон үр дүн Yu-dong Cai, Harny Yu нарийн тодорхойлсон 100 орчим β-эргэлтүүдийг уургийн өгөгдлийн сангийн файлаас ф, ψ өнцөг болон захын хоёр амин хүчлийн Ca атомуудын хоорондох зай $d < 7\text{\AA}$ -аас гэсэн нөхцлийг хангасан 71 β-эргэлт байгаа нь тогтоогдсон [5].

HELFIT программаар бодсон спиралийн параметруудын үр дүн :

		β-эргэлт I төрөл		β-эргэлт II төрөл		Статистик			
		Дундаж	SE	Дундаж	SE	$S(\bar{I}, \bar{II})$	t-тест	t-хүснэгт	($t_{\%}$)
	Өгөгдөл	41		30					
Спиралийн параметрууд	P	5,57 Å	+/- 0,20 Å	3,29 Å	+/- 0,61 Å	0,31	1,80	1,67	0,90
	N	3,73	+/- 0,06	4,51	+/- 0,09	0,07	2,56	2,39	0,98
	r	2,33 Å	+/- 0,04 Å	2,88 Å	+/- 0,08 Å	0,06	2,16	2,00	0,95
	Dr	0,04 Å	+/- 0,00 Å	0,10 Å	+/- 0,01 Å	0,01	2,87	2,66	0,99
	p	0,04 Å	+/- 0,00 Å	0,10 Å	+/- 0,01 Å	0,01	2,54	2,39	0,98
	Эргэлт	+1		+1					

Хүснэгт №2: Спиралийн тэнхлэг дагуу нэг эргэлтэнд хийх алхам (P), 1 эргэлтэд оногдох амин хүчлийн тоо (N), радиус (r), идеаль спиралиас гажилтын алдаа (p), стандарт алдаа (SE), хоёр хэмжигдэхүүний стандарт гажилтын үнэлгээ $S(\bar{I}, \bar{II})$, хоёр өөр хамааралгүй, ижил утгатай хэмжигдэхүүний үнэлгээ (t-test), хүснэгтийн үнэлгээ(t-table), магадлалын ялгаа ($t_{\%}$) жишээ нь: $t_{\%}=0,95$ бол 95%-ийн ялгаатай [9].

Уургийн өгөгдлийн сангийн файлаас тодорхойлсон β-эргэлтүүд

DSSP программаар тодорхойлсон үр дүн:

		β-эргэлт I төрөл		β-эргэлт II төрөл	
		Дундаж[°]	SE [°]	Дундаж [°]	SE [°]
	Өгөгдөл	234		218	-
Хажуугын өнцгүүд Ca	Φ (i+1)	-65,9	+/- 2,0	-61,5	+/- 1,4
	Ψ (i+1)	-29,3	+/- 2,3	134,3	+/- 1,8
	Φ (i+2)	-94,5	+/- 2,4	89,1	+/- 2,2
	Ψ (i+2)	-1,3	+/- 1,8	-1,9	+/- 2,6
Ca(i)- Ca(i+3)	$d < 7\text{\AA}$	5,63Å	+/- 0,1 Å	5,74 Å	+/- 0,3 Å

Хүснэгт №3: β-эргэлтийн ф,ψ өнцөг, d зайн тодорхойлсон үр дүн Уургийн өгөгдлийн сангаас ялгаж авсан 5460 файлыг *DSSP* программаар бодолт хийж бодсон үр дүнгээс β-эргэлтийн тодорхойлолтыг хангасан 452 β-эргэлтийг тогтоосон.

HELFIT программаар бодсон спиралийн параметруудын үр дүн :

		β-эргэлт I төрөл		β-эргэлт II төрөл		Статистик			
		Дундаж	SE	Дундаж	SE	$S(\bar{I}, \bar{II})$	t-тест	t-хүснэгт	($t_{\%}$)
	Өгөгдөл	234		218					
Спиралийн параметрууд	P	5,6 Å	+/- 0,04 Å	3,4 Å	+/- 0,03 Å	0,42	2,63	2,39	0,98
	N	3,7	+/- 0,03	4,4	+/- 0,09	0,05	2,24	2,39	0,98
	r	2,42 Å	+/- 0,04 Å	2,9 Å	+/- 0,08 Å	0,04	2,48	2,39	0,98
	Dr	0,03 Å	+/- 0,02 Å	0,1 Å	+/- 0,02 Å	0,02	2,67	2,66	0,99
	p	0,02 Å	+/- 0,01 Å	0,2 Å	+/- 0,01 Å	0,01	2,43	2,39	0,98
	Эргэлт	+1		+1					

Хүснэгт №4: Спиралийн тэнхлэг дагуу нэг эргэлтэнд хийх алхам (P), I эргэлтэд оногдох амин хүчлийн тоо (N), радиус (r), идеаль спиралиас гажилтын алдаа (p), стандарт алдаа (SE), хоёр хэмжигдэхүүний стандарт гажилтын үнэлгээ $S(\bar{I}, \bar{II})$, хоёр өөр хамааралгүй, ижил утгатай хэмжигдэхүүний үнэлгээ (t -test), хүснэгтийн үнэлгээ (t -table), магадлалын ялгаа ($t_{\%}$) жишээ нь: $t_{\%}=0,95$ бол 95%-ийн ялгаатай [9].

Дүгнэлт

- Yu-dong Cai, Harny Yu нар туршилгаар 100 орчим β-эргэлт тодорхойлсон байдаг[4]. Бид судалгаагаар ϕ , ψ өнцөг, хоорондох зайг тодорхойлж үзэхэд 71β-эргэлт байгааг тогтоосон.
- HELFIT программ ашиглаж уургийн хоёрдогч бүтцийн β-эргэлт элементийн геометр параметруудийг тодорхойлж β-эргэлтэнд ангилал хийсэн.

Эхний үр дүнгээс харвал эдгээр 71 β-эргэлт нь зөвхөн I ба II төрөлд хамаарагдаж байгаа нь тогтоогдсон. β-эргэлтийн I болон II-төрлийн спиралийн параметруудийн дундаж нь хоорондоо статистикийн хувьд мэдэгдэхүйц ялгаатай байгааг илэрүүлж уургийн хоёрдогч бүтцийн β-эргэлтийн төрлүүдийг спиралийн параметрээр нь ангилах боломжтойг тогтоов.

Summary

A protein is built up from a long-chain polymer of amino acids, called a polypeptide chain. Polypeptide chains formed by 20 different amino acids are more versatile because of the great number of different side chains. Driven by varieties of interaction forces, polypeptide chains are folded into many different three-dimensional structures. The protein architecture is characterized by the repetitive motif elements such as α -helices and β -sheets, and turns (δ , γ , β , α , π), bulges, and random coil structures.

The turns are subdivided 9 classes on the basis of the phi, psi (ϕ, ψ) angles of residues $i+1$ and $i+2$ and given from four amino acid sequence. This tetrapeptide chain is not in a helical conformation, but folds back on itself by nearly 180° .

Therefore, the widely accepted definition for β -turns is: 1) The β -turn is relatively common in proteins and it is characterized by having at least two consecutive $\text{CO}(i) \leftarrow \text{NH}(i+3)$ hydrogen bonds between the main chain carbonyl oxygen and amide hydrogen atoms. 2) A β -turn comprises four consecutive

residues where the distance between $\text{Ca}(i)$ and $\text{Ca}(i+3)$ is less than ($d < 7\text{\AA}$). 3) β -turn can be determined by (ϕ, ψ) angles for hydrogen-bonded β -turns.

In this work β -turn type was studied. The helical parameters pitch (P), residues per turn (n), radius (r), and root mean square deviation (RMSD) from the best-fit helix were determined by using the HELFIT program. In addition, the electrostatic interaction energy between H-bonding groups was calculated by DSSP program.

Ишлэсэн материал

1. [Pauling L, Corey RB, Branson HR](#) (1951). "The Structure of Proteins: Two Hydrogen-Bonded Helical Configurations of the Polypeptide Chain". *Proceedings of the National Academy of Science in Washington* : 205–211
2. Kabsch K, Sander C (1983). "Identification of structural motifs from protein coordinate data: secondary structure and first-level supersecondary structure". *Biopolymers*:577–637
3. [Richardson JS](#) (1981). "The Anatomy and Taxonomy of Proteins". *Advances in Protein Chemistry* : 167–339
4. Yu-dong Cai, Harny Yu, and Kuo-Chen Chou (1997) "Prediction of β -Turns" *Journal of Protein Chemistry*:363-376 (1998)
5. Yu-Dong Ca, Kuo-Chen Chou (1998). "Artificial Neural Network Model for Predicting α -Turn Types". *Analytical Biochemistry*: 407–409 (1999)
6. Kuo-Chen Chou (2000). "Prediction of Tight Turns and Their Types in Proteins". *Analytical Biochemistry*: 1-16 (2000)
7. Harpreet Kaur and G.P.S. Raghava (2004) "A neural network method for prediction of β -turn types in proteins using evolutionary information" <http://bioinformatics.oxfordjournals.org>
8. Wolfgang K, Christian S, "Pattern Recognition of Hydrogen-Bonded and Geometrical features" *Biopolymers*: 1983 Dec;22(12):2577-637
9. Enkhbayar P, Damdinsuren S, Osaki M, Matsushima N (2008) "Helix fitting by a total least squares method", *Computational Biology and Chemistry* (2008) 307–310
10. Enkhbayar P, Hikichi K, Osaki M, Robert H. Kretsinger, Matsushima N, (2006) " 3_{10} -Helices in Proteins Are Parahelices" *Wiley InterScience*: (2006) 691–699.
11. Guoli Wang; Roland, L; Dunbrack, Jr; "PISCES: recent improvements to a PDB sequence culling server".
12. Энэбиш Д, Мөнхцэцэг Ж, Наранцэцэг Л, "Биохими" ЭМШУС (2007) 24-38х.
13. Пүрэв Д, Цэвэгсүрэн Н, "Биохими" МУИС (2000) 28-40х, 166х
14. <http://www.pdb.org> (2009 оны 11 сар)
15. <http://en.wikipedia.org/wiki/> (2009 оны 11 сар)
16. <http://dunbrack.fccc.edu/PISCES.php> (2010 оны 3 сар)