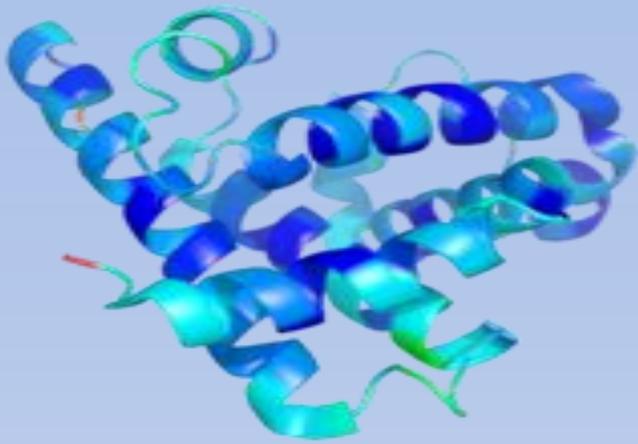


实用生物信息学期末汇报

人肌球蛋白中MHC II b  
基本生物信息学分析研究

G14组

王积栋 赵莎莎 单丽玲 赵颖慧



# 背景

肌球蛋白是各类肌细胞中含量最多的结构蛋白和收缩蛋白,是构成肌肉肌原纤维粗丝的基本组成蛋白,不仅是骨骼肌重要的结构蛋白和收缩蛋白,而且还有ATP酶活性,故通常也称之为肌球蛋白ATP酶。肌肉收缩的直接能量来源是肌球蛋白对ATP的水解。

肌球蛋白是横纹肌细胞表达最丰富的蛋白,约占其总蛋白库的25%。是一个六聚体的蛋白质大分子,由两条Mr约为220 000的重链(myosin heavy chain, **MHC**)和两条Mr为16 000~27 000的轻链(myosin light chain, **MLC**)组成。

# 背景

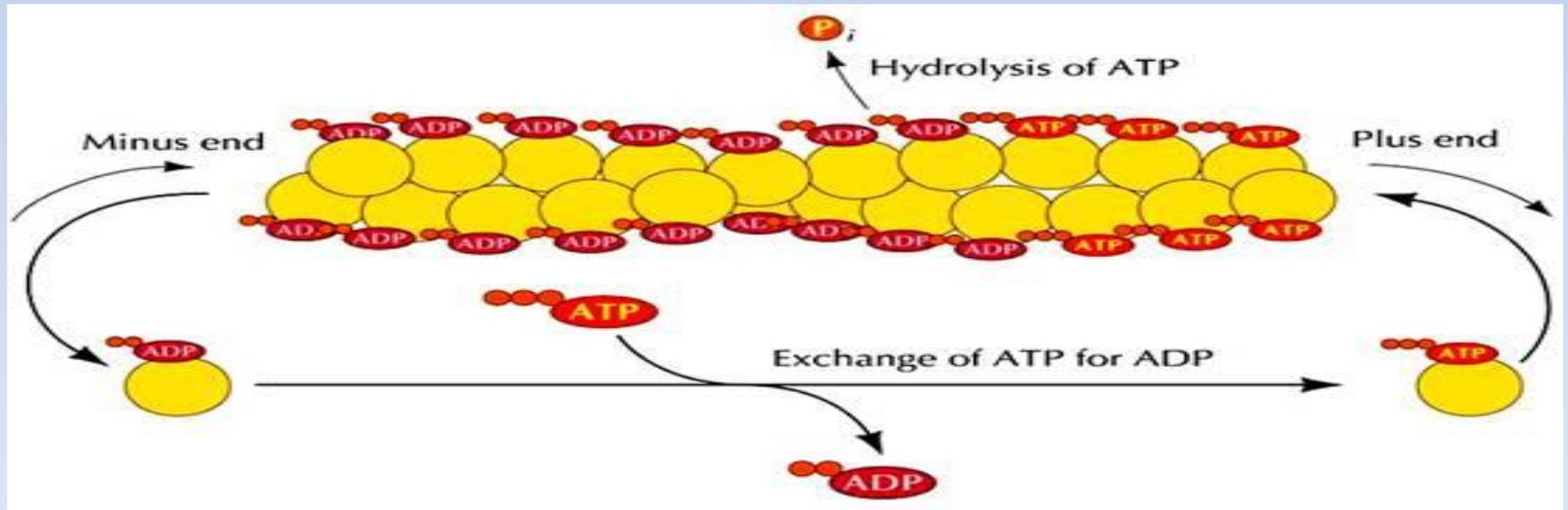
在哺乳动物的横纹肌中，至少有9种肌球蛋白重链的异形体被发现(包括心肌和骨骼肌里的)：①胚胎型MHC(MHC-Emb)和新生儿型MHC(MHC-Neo)。② $\alpha$ -心肌型MHC。③ $\beta$ -心肌型MHC或者慢收缩I型MHC(在骨骼肌中表达)。④快收缩IIa型MHC。⑤快收缩IIx/II d型MHC。⑥快收缩IIb型。⑦眼外肌型MHC(MHC-Eom)。⑧颞颥型MHC或咀嚼型(m-MHC)[4]。⑨喉型MHC(MHC-II L或MHC-LL)。成年哺乳动物骨骼肌中有4种小同的MHC异形体，它们是MHC-I( $\beta$ -心肌型MHC)、MHC-IIa、MHC-IIx(或MHC-II d)和MHC-IIb异形体。

# Contents

1. 蛋白理化性质分析
2. 一级结构柔韧性、表面可及性与亲水性的预测
3. 二级结构预测
4. 信号肽切割位点预测
5. 结构域分析
6. 蛋白的空间结构预测

# 一级结构分析

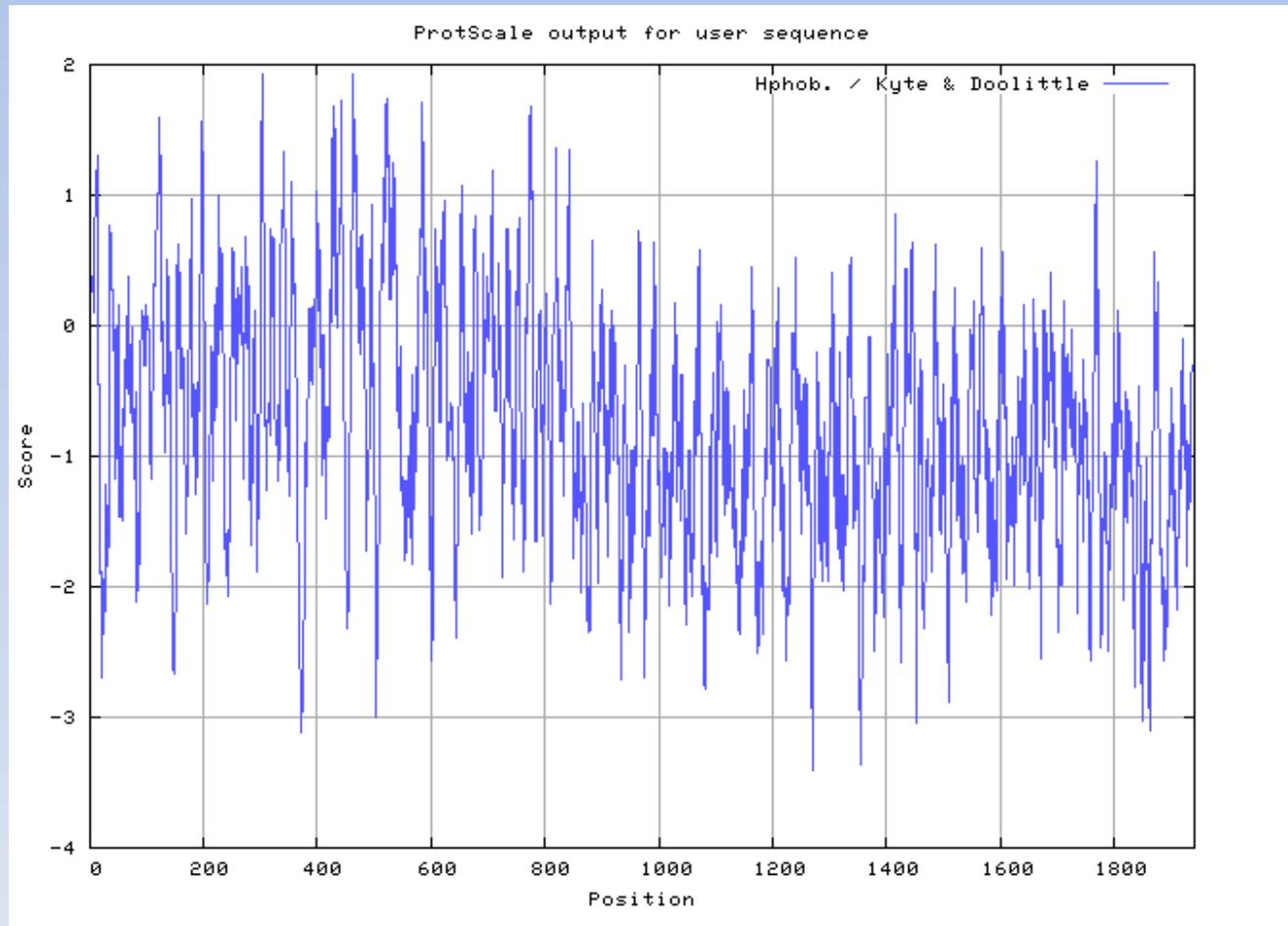
- 亲水疏水性分析
- 柔性刚性分析
- 溶剂可及性分析



# 蛋白理化性质分析

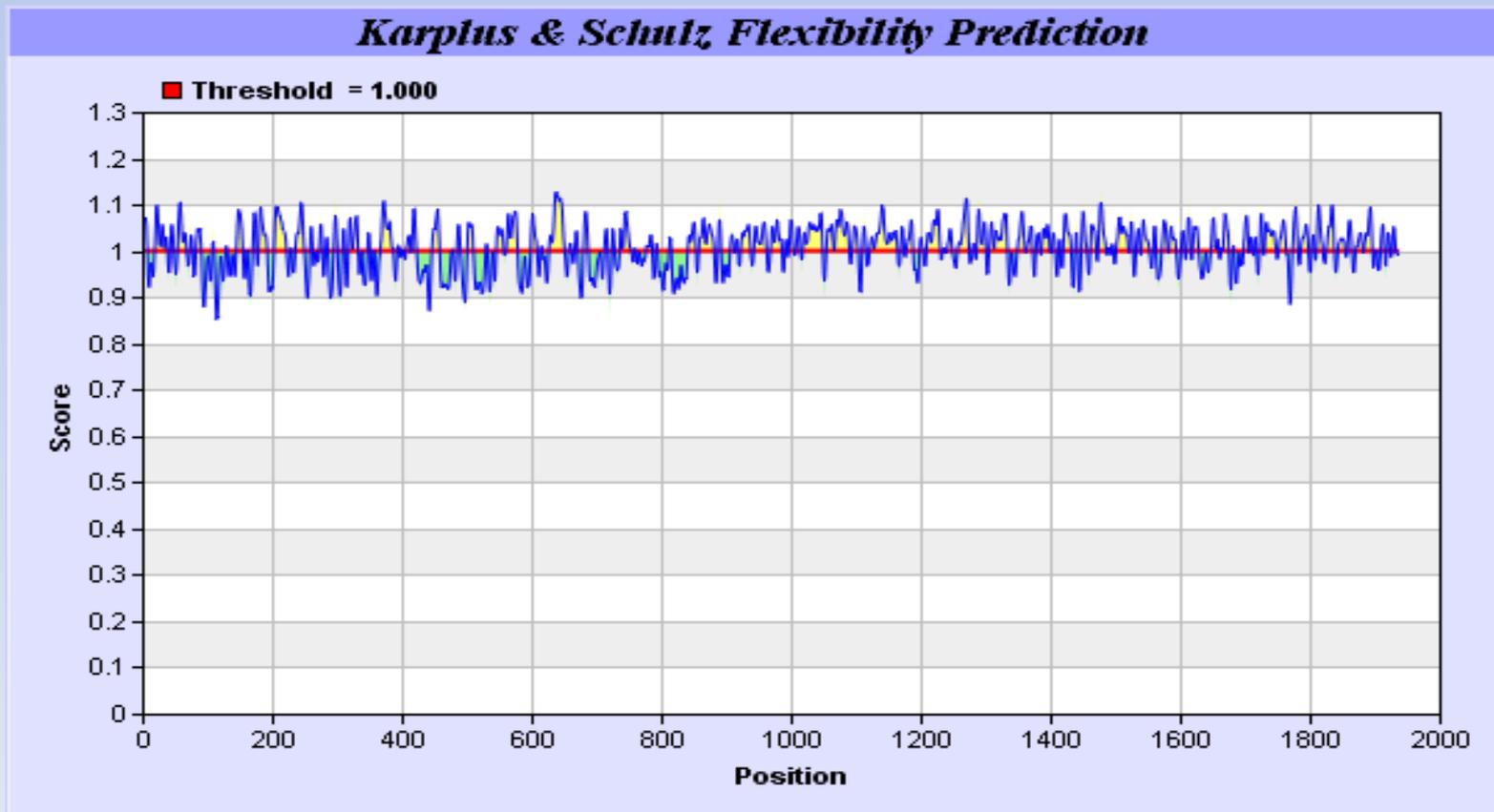
	MHC II b
<b>Number of amino acids</b>	1941
<b>Molecular weight</b>	223044.4
<b>Theoretical pI</b>	5.64
<b>Total number of negatively charged residues (Asp + Glu)</b>	358
<b>Total number of positively charged residues (Arg + Lys)</b>	315
<b>Aliphatic index</b>	82.49
<b>Grand average of hydropathicity (GRAVY)</b>	-0.760

# 用ProtScale进行疏水性分析



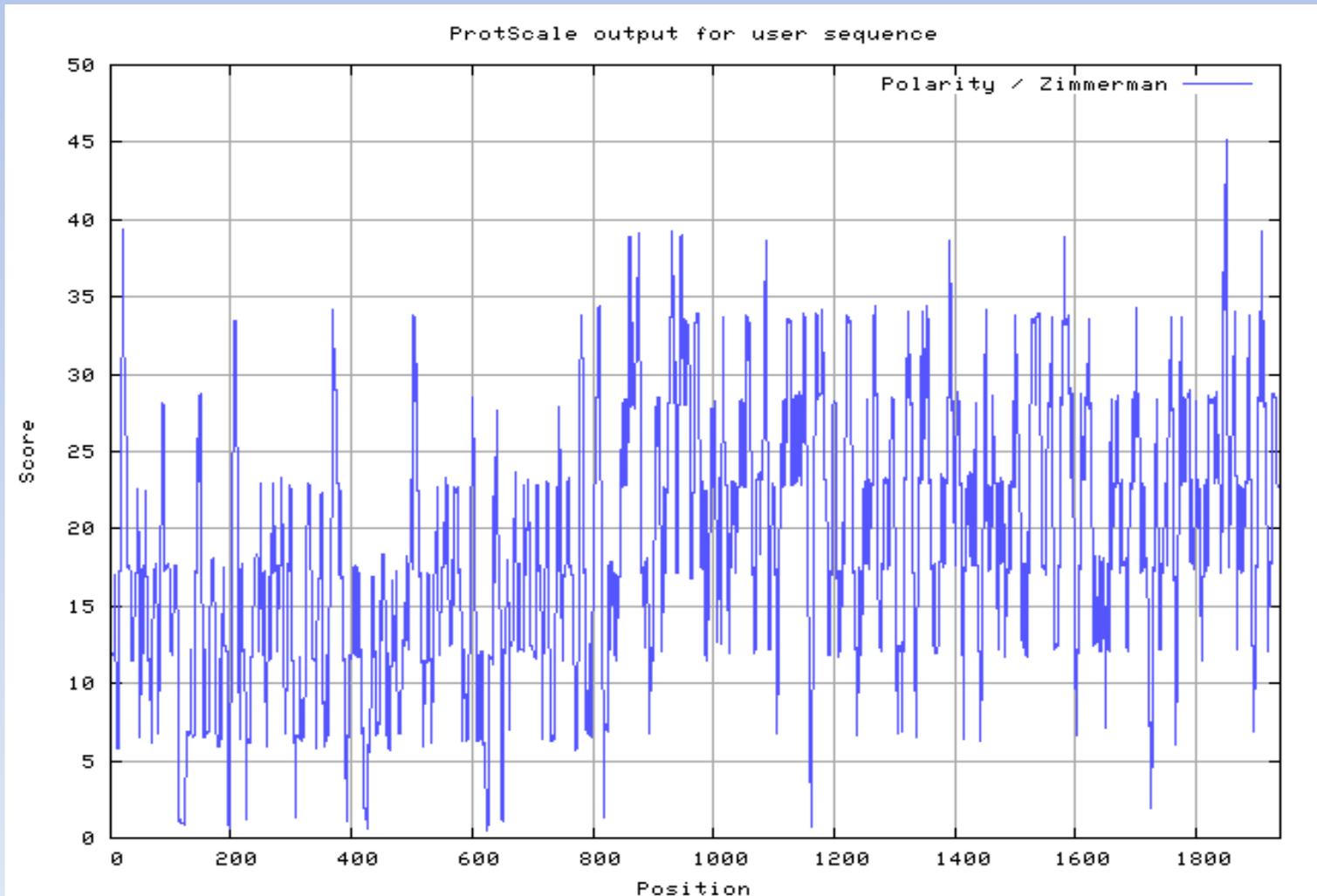
## 柔性分析

柔韧性参数是肽骨架自由伸展卷曲的程度，一定的柔韧性有利于与ATP结合，活动性强的氨基酸残基即柔韧性大的位点，在下图中（横轴为蛋白氨基酸区段，纵轴为柔韧度值），高于阈值基线**1.0**的氨基酸区段具有较好的柔韧性

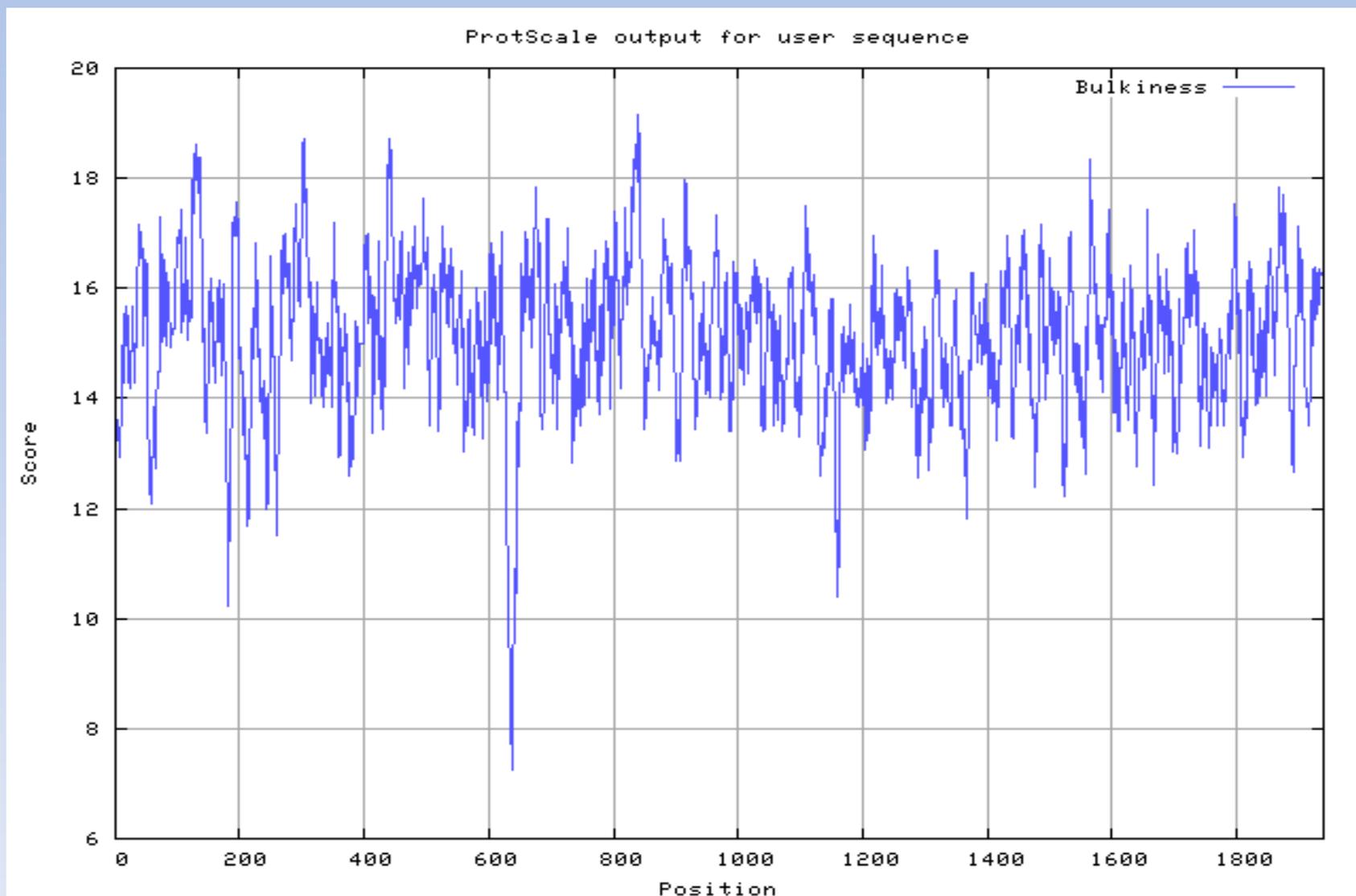


## 用ProtScale进行溶剂可极性分析

可及性参数，是指蛋白质中氨基酸残基被溶剂分子接触的可能性，反映了蛋白质残基的分布情况（横轴为氨基酸区段，纵轴为可及性参数数值）



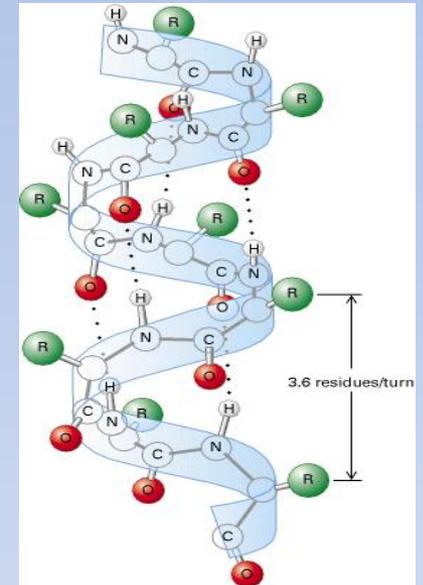
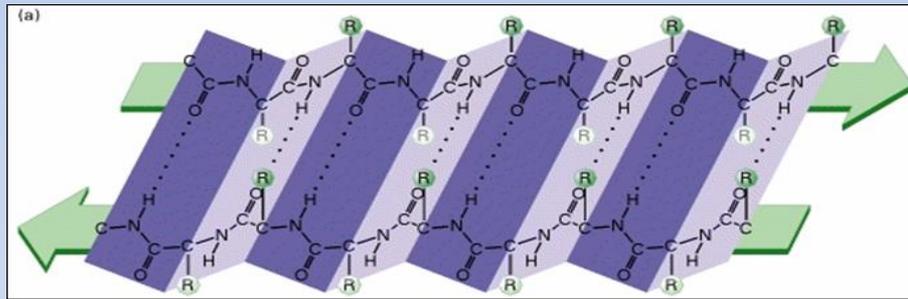
# 用ProtScale进行空间位阻分析



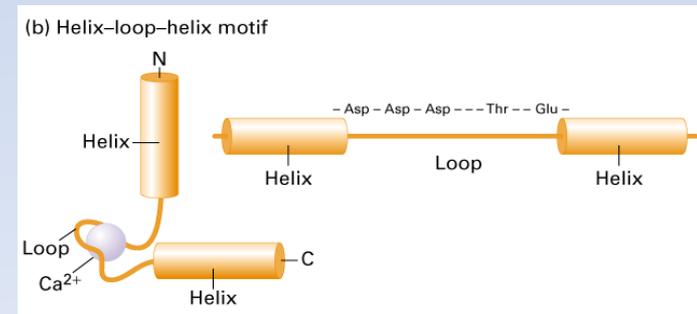
# 蛋白质二级结构分析

二级结构：主要是氢键维持的结构

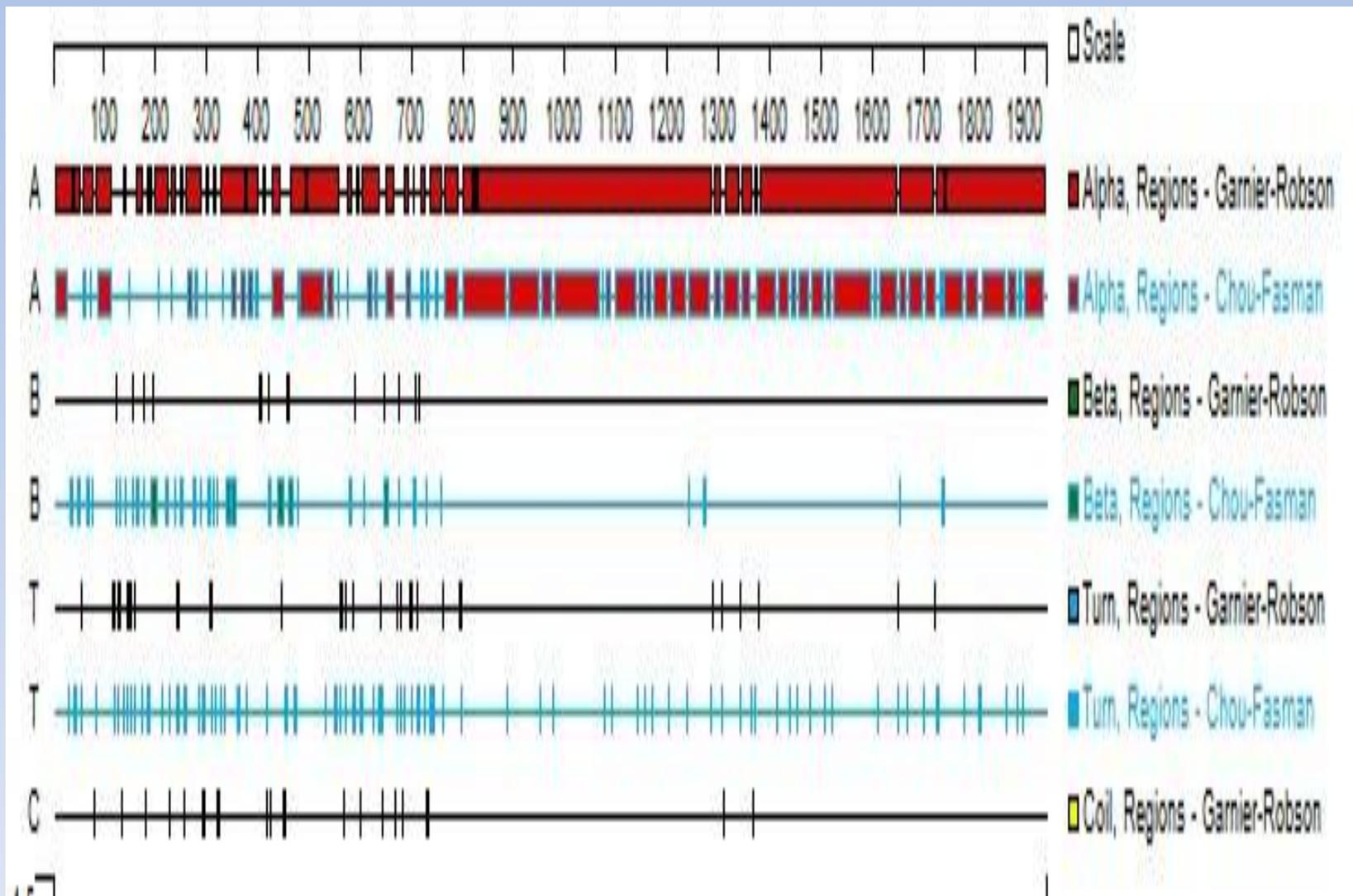
- $\alpha$ 螺旋 ( $\alpha$ -helix)
- $\beta$ 折叠 ( $\beta$ -sheet)



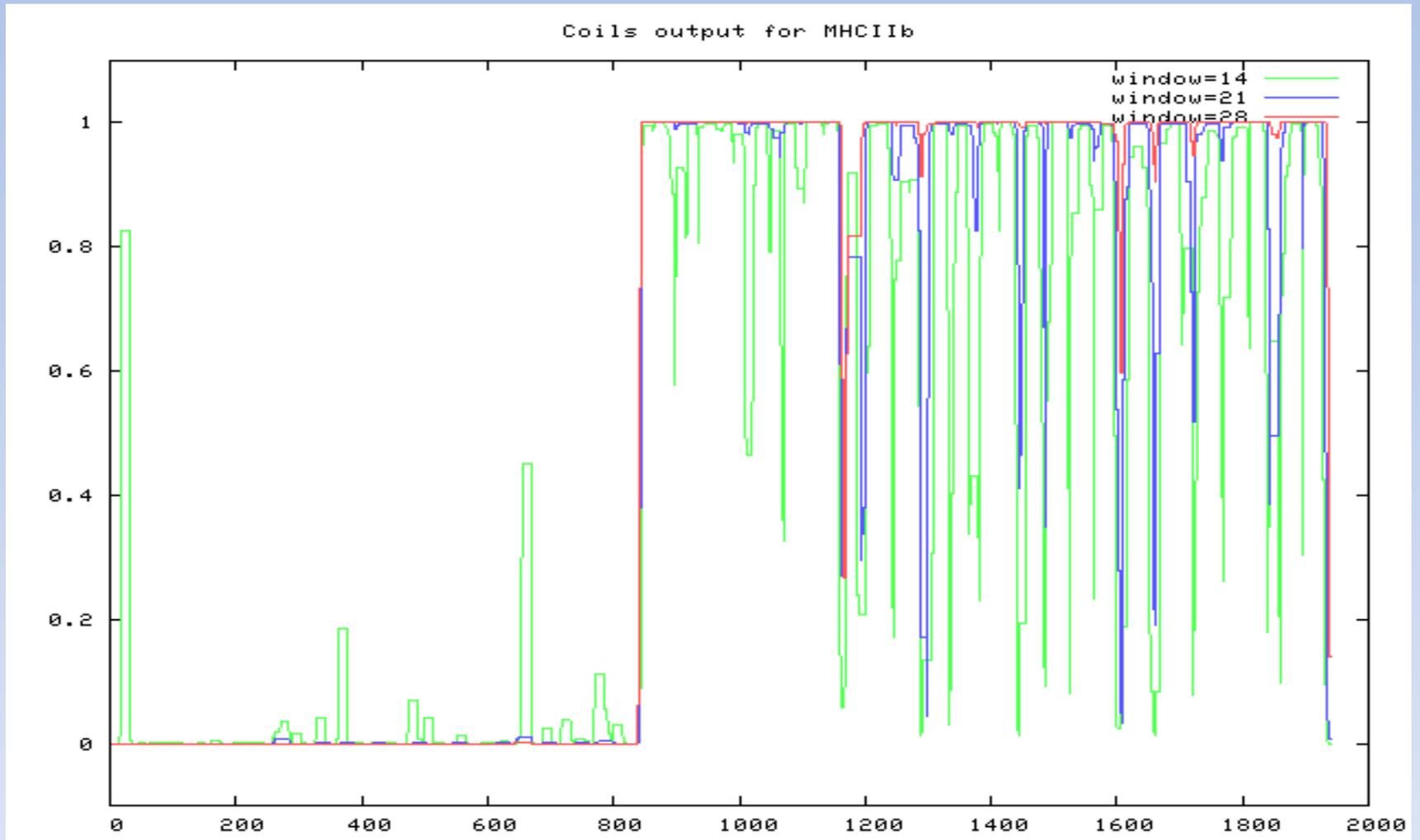
- 转角 (**turn**) 环 (**loop**)
- 无规则卷曲 (**random coil**)



运用DNASTar中Protean软件的Chou-Fasman和Garnier-Robson方法分析MHCIIb的 $\alpha$ -螺旋、 $\beta$ -折叠、 $\beta$ -转角和Coil所在区段



# 用EXPASY Tool中的 coil软件进行卷曲分析



843-1939

# 三级结构

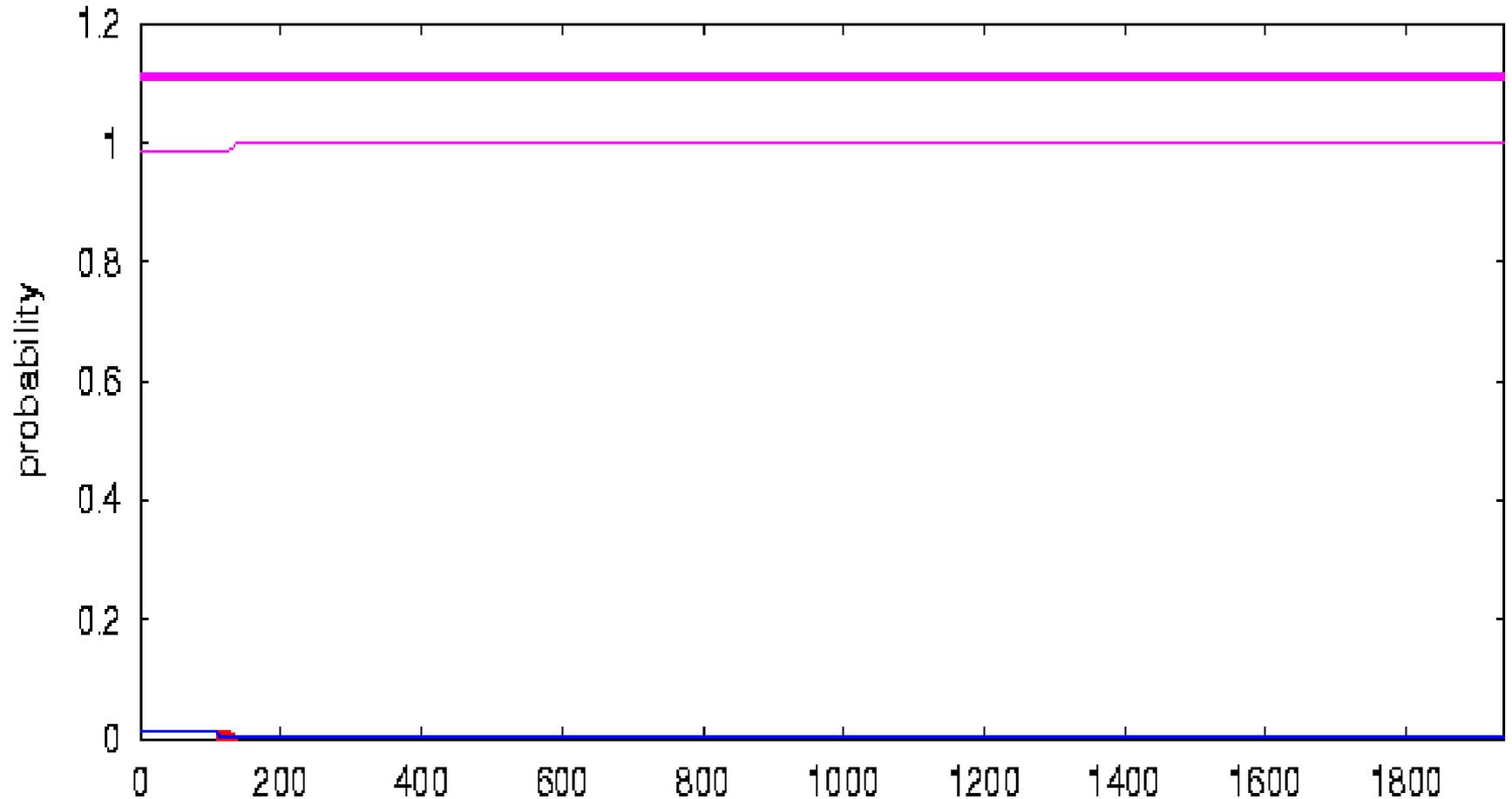
- 跨膜螺旋预测
- 信号肽预测
- 亚细胞定位



# 跨膜螺旋预测

## Myosin heavy chain IIb

TMHMM posterior probabilities for sp\_Q9Y623\_MYH4\_HUMAN



transmembrane —

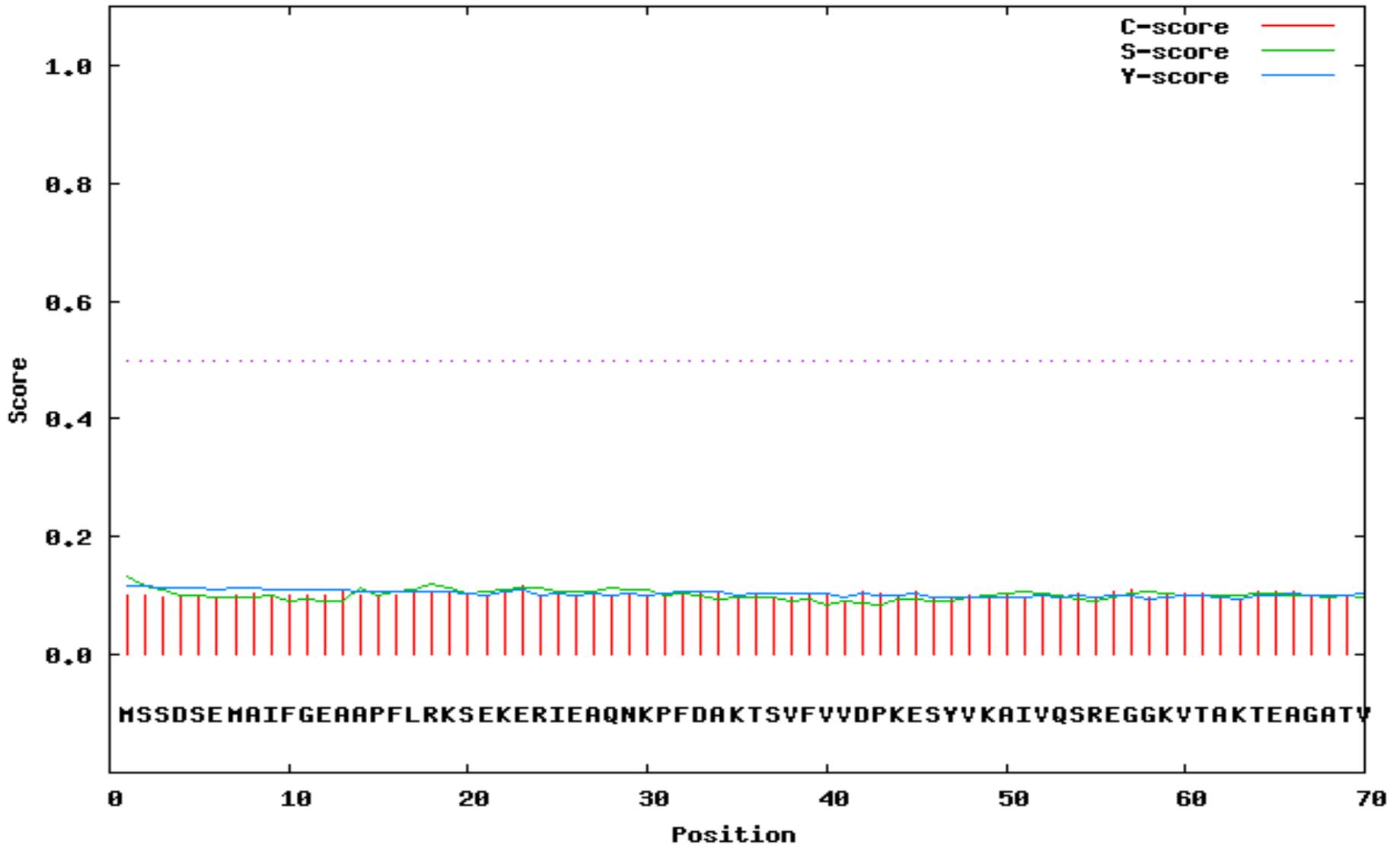
inside —

outside —

# 信号肽预测

## Myosin heavy chain IIb

SignalP-4.0 prediction (euk networks): sp\_Q9Y623\_MYH4\_HUMAN



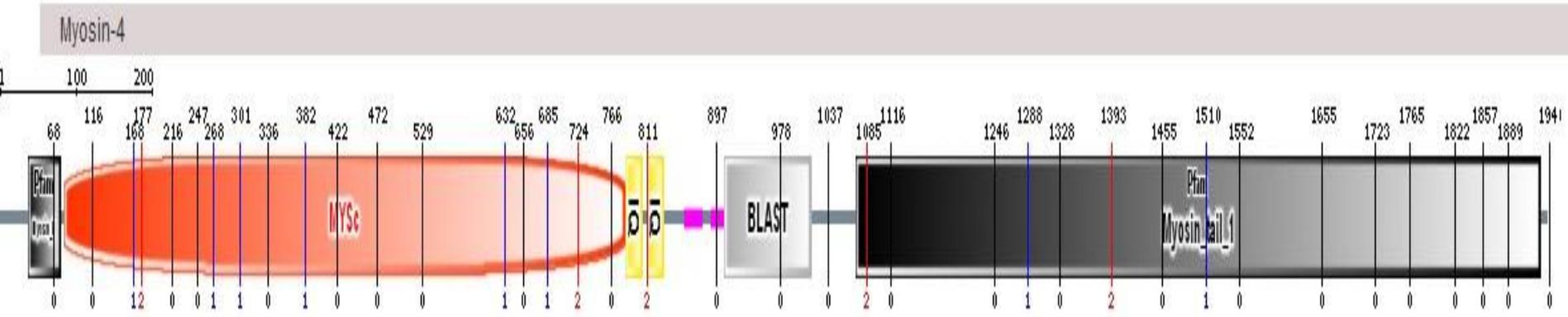
# 亚细胞定位

targetp v1.1 prediction results

Name	Len	mTP	SP	other	Loc	RC
MYH4_HUMAN	1939	0.073	0.068	0.915	_	1

结果表明：可存在于其他任何位置,无精确定位。

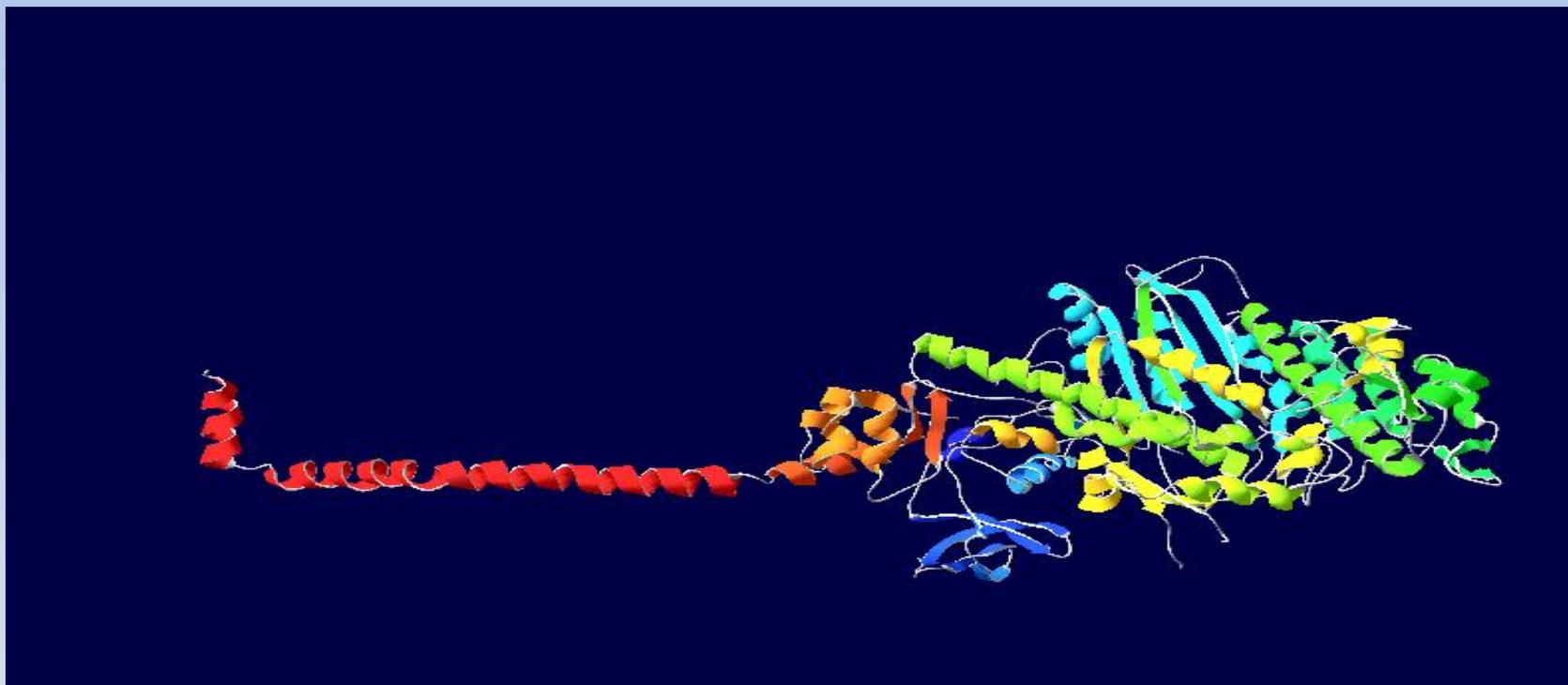
# SMART进行空间结构分析



Transmembrane segments as predicted by the [TMHMM2](#) program , coiled coil regions determined by the [Coils2](#) program , segments of low compositional complexity determined by the [SEG](#) program . Signal peptides determined by the [SignalP](#) program . Disordered regions detected by [DisEMBL](#) . Intron positions are indicated with vertical lines showing the intron phase and exact position in AA.

Domain	1 - 784	784	Myosin head-like
Domain	785 - 814	30	IQ
Nucleotide binding	179 - 186	8	ATP <span style="border: 1px solid black; border-radius: 10px; padding: 2px;">Potential</span>
Region	659 - 681	23	Actin-binding <span style="border: 1px solid black; border-radius: 10px; padding: 2px;">By similarity</span>
Region	761 - 775	15	Actin-binding <span style="border: 1px solid black; border-radius: 10px; padding: 2px;">By similarity</span>
Coiled coil	843 - 1939	1097	<span style="border: 1px solid black; border-radius: 10px; padding: 2px;">Potential</span>

# 用swiss-model进行空间结构预测



# 研究前景

不同运动模式和运动负荷可导致肌纤维类型发生不同转变,一般认为,耐力性训练可观察到II b型向II a型转变,但是由II a型转变为I型是非常困难的,目前许多研究证实,耐力训练、阻力训练和速度训练后II型肌纤维的II b向II a转化,而在停止训练或肌肉废用后,II型肌纤维出现相反的变化,即II a向II b转变。

# 参考文献

- 【1】 苏艳红等. 运动与肌球蛋白研究综述. [J]天津体育学院学报, 2008, 23:328-332
- 【2】 Schiaffino S, Reggiani C. Molecular diversity of myofibrillar proteins: gene regulation and functional significance [J]. *Physiol Rev*, 1996, 76:371- 423.
- 【3】 张华等. 运动训练对肌球蛋白重链及肌纤维转型的影响. [J] *Sport Science Research*, 2005.
- 【4】 Close R. The relation between intrinsic speed of shortening and duration of the active state of muscle [J]. *J Physiol Lond*, 1965, 180:542- 559.
- 【5】 Schiaffino S S, Ausoni L, Gorza L, et al. Myosin heavy chain isoforms and velocity of shortening of type 2 skeletal muscle fibres [J]. *Acta Physiol Scand*, 1988, 134:565- 566.
- 【6】 Andersen J L, Klitgaard H, Saltin B. Myosin heavy chain isoforms in single fibres from m. vastus lateralis of sprinters: influence of training [J]. *Acta Physiol Scand*, 1994, 151:135- 142.

# 致谢

感谢罗老师的谆谆教导

感谢同学们的无私帮助

感谢班长和组员的辛勤付出

谢谢大家

请大家批评指正！