



Βιοπληροφορική

Ενότητα 17:

Δομή Πρωτεϊνών, 1 ΔΩ

Τμήμα: Βιοτεχνολογίας

Όνομα καθηγητή: Τ. Θηραίου



Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο



ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ & ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ, ΠΟΛΙΤΙΣΜΟΥ & ΑΘΛΗΤΙΣΜΟΥ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ

Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης





Μαθησιακοί Στόχοι

- επισκόπηση των βασικών στοιχείων των πρωτεϊνικών δομών.
- συσχέτιση ακολουθίας – δομής – λειτουργίας.
- παρουσίαση πεδίων δομικής βιοπληροφορικής.



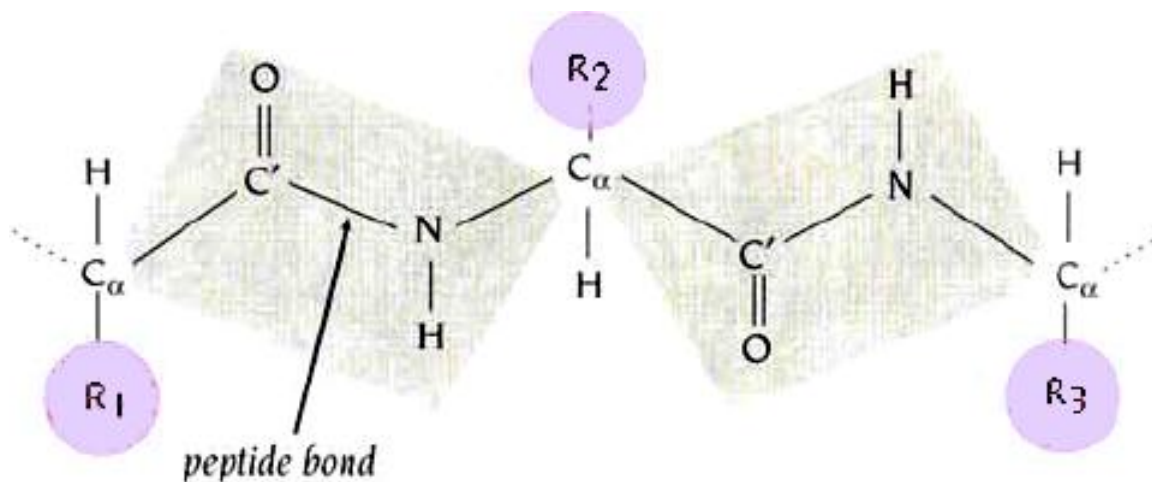
Λέξεις Κλειδιά

- Λέξεις κλειδιά: Πρωτεϊνική δομή, α-έλικα, β-πτυχωτή επιφάνεια, Δομική βιοπληροφορική.
- Key words: Protein structure, alpha-helix, beta-sheet, Structural bioinformatics.



Κύρια Αλυσίδα (Main Chain) 1/2

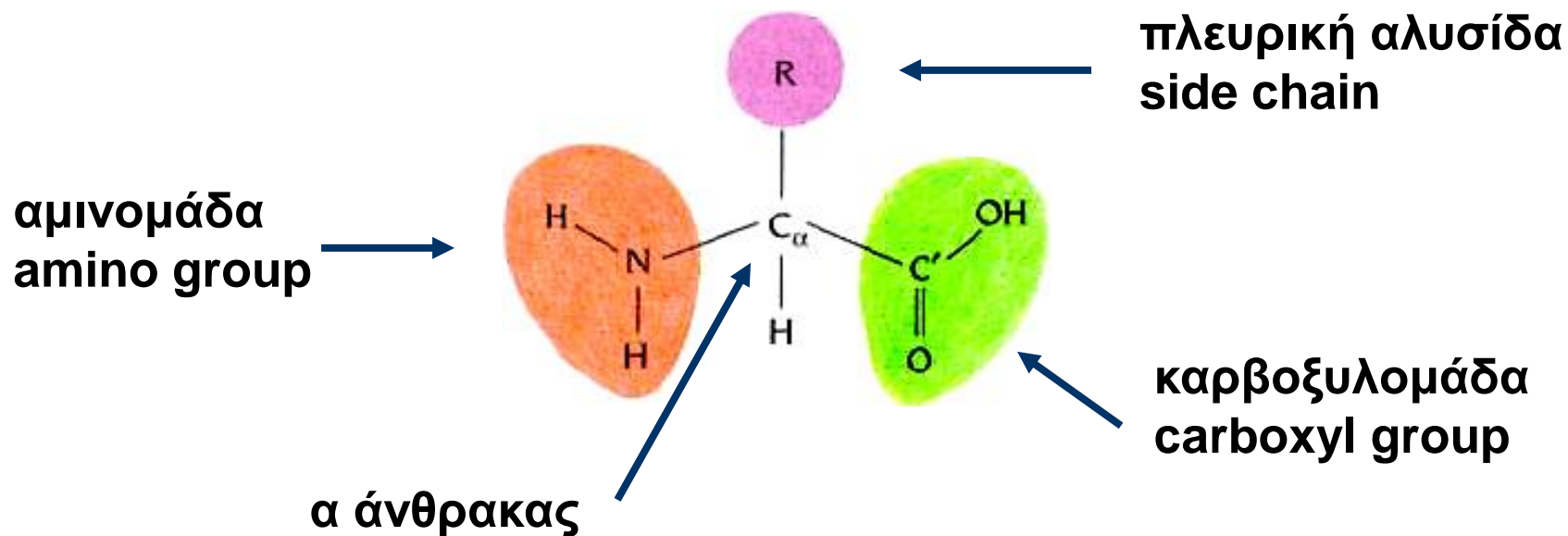
κύρια αλυσίδα
main chain



ΠΕΠΤΙΔΙΚΟΣ ΔΕΣΜΟΣ

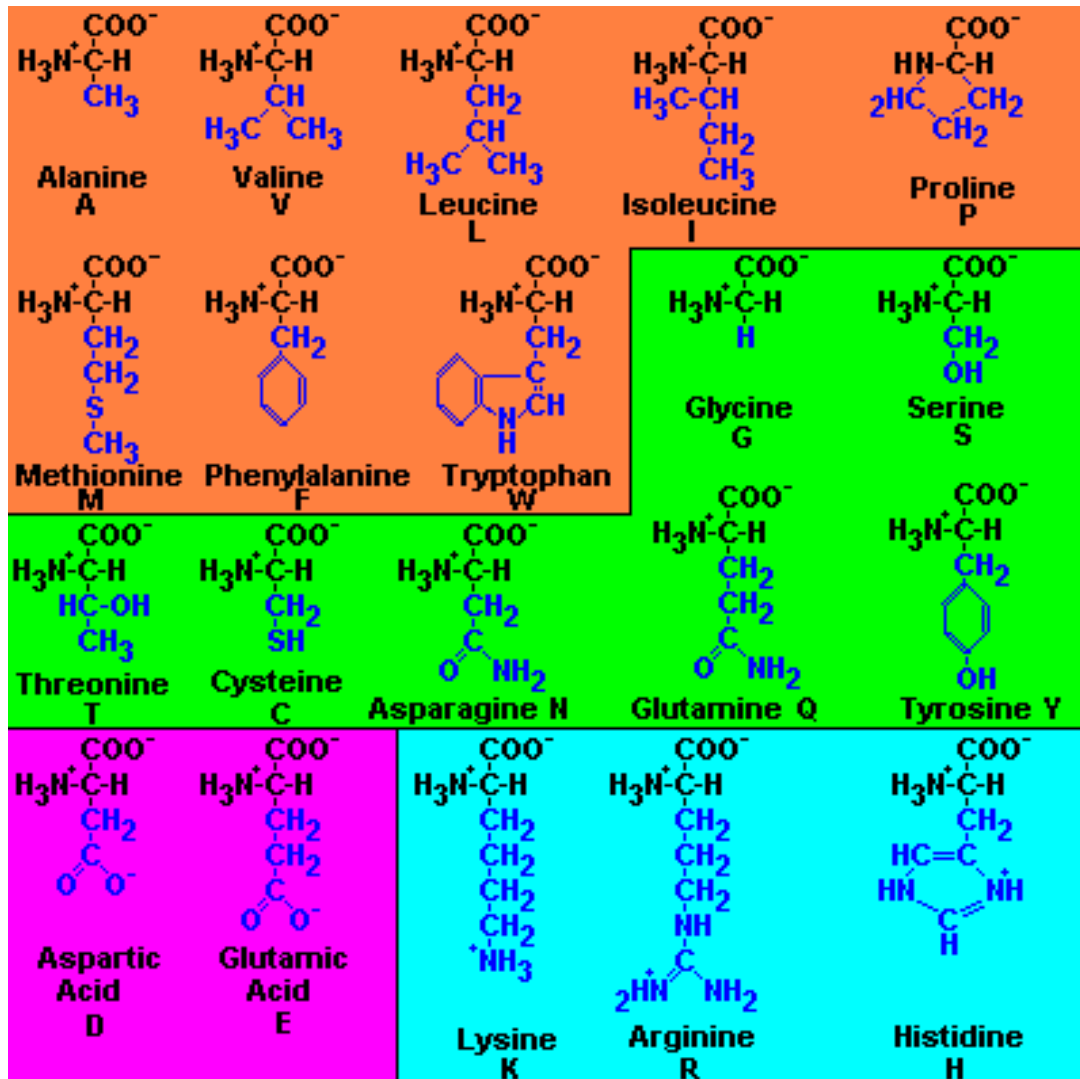


Κύρια Αλυσίδα (Main Chain) 2/2



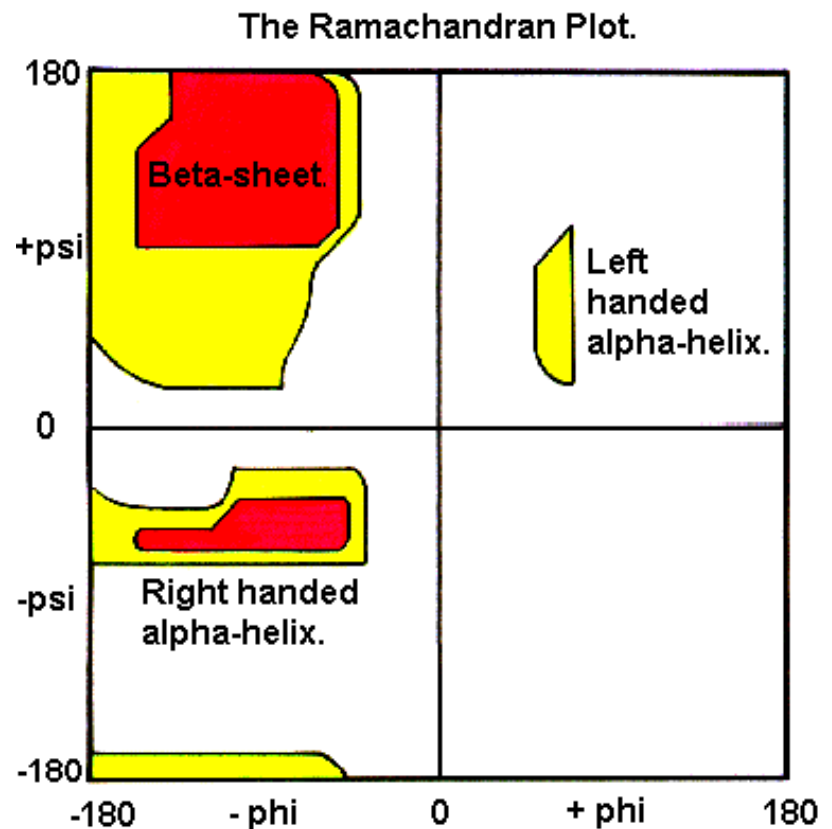
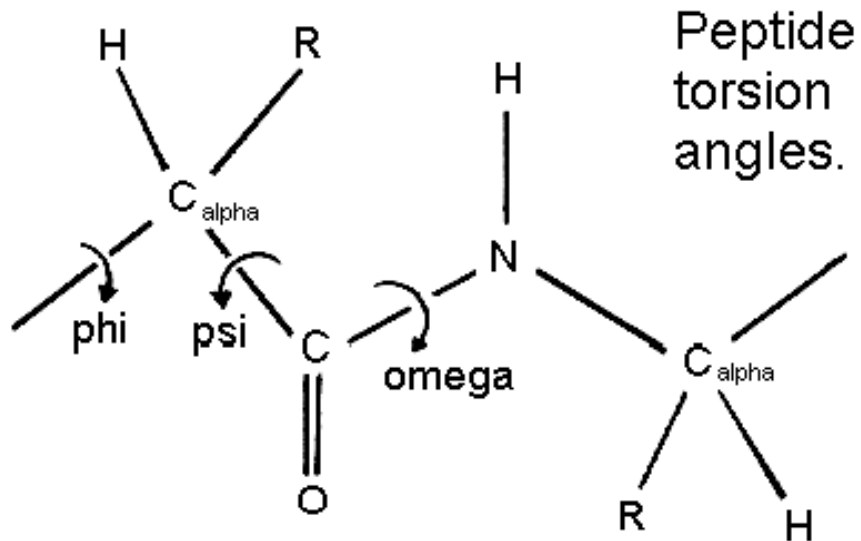


AminoAcids





Ramachandran Plot





Δομή Πρωτεϊνών

● Πρωτοταγής

- αμινοξική ακολουθία

● Δευτεροταγής

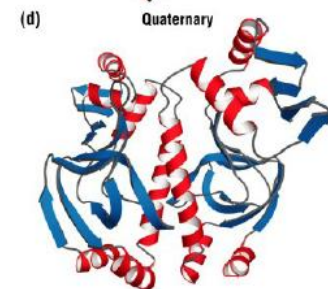
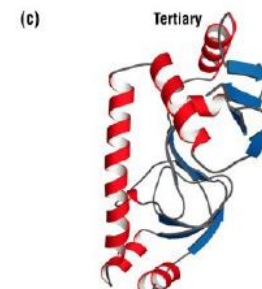
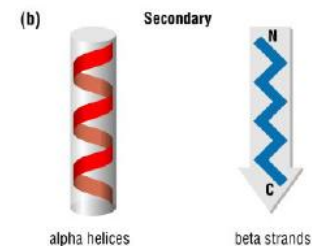
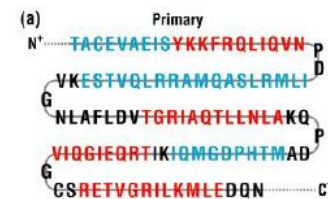
- τοπικές διαμορφώσεις της πολυπεπτιδικής αλυσίδας

● Τριτοταγής

- δίπλωμα της πολυπεπτιδικής αλυσίδας στο χώρο

● Τεταρτοταγής

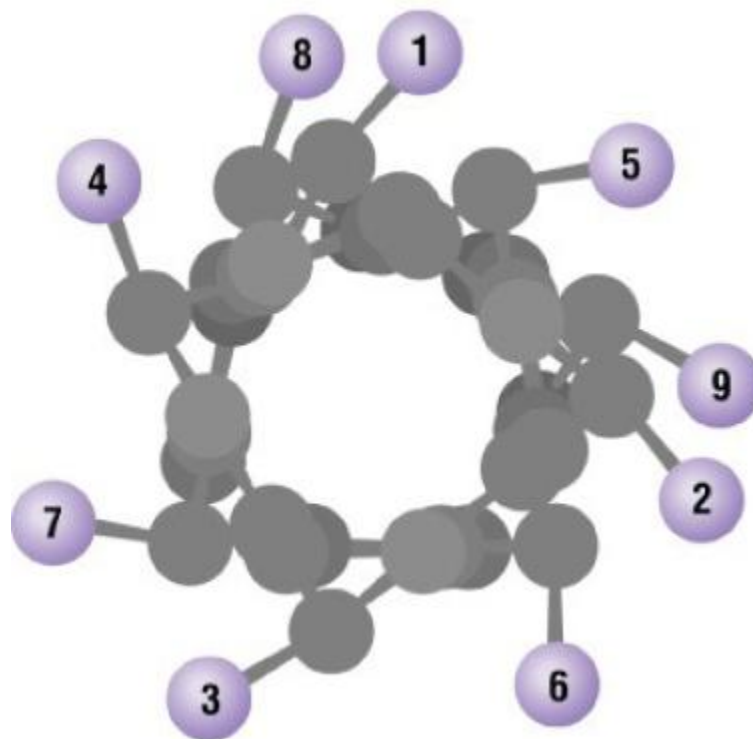
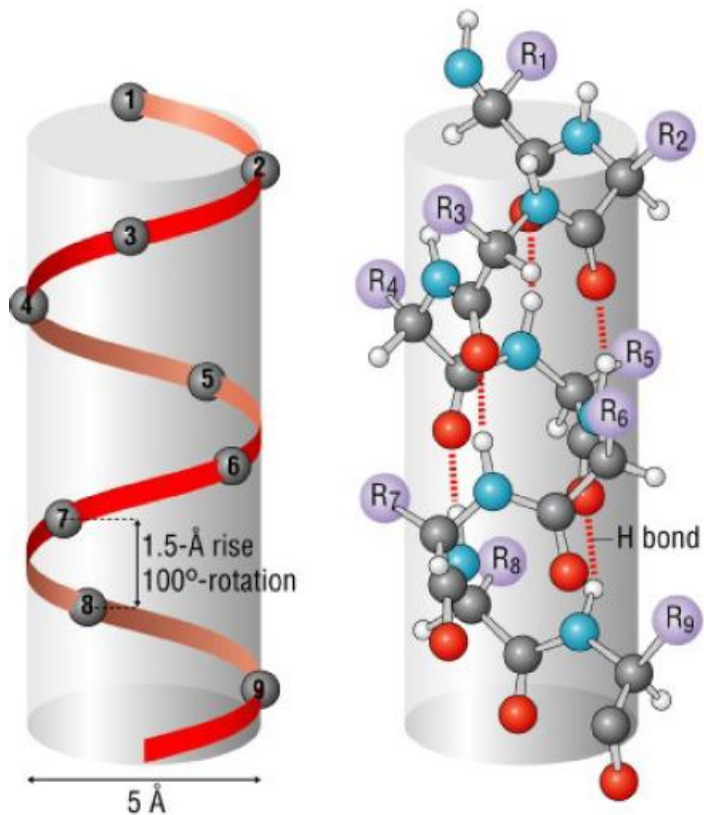
- αλληλεπίδραση πολυπεπτιδικών αλυσίδων





α - Έλικα

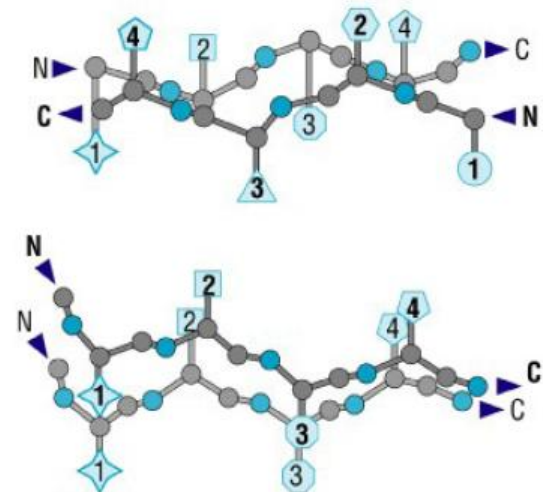
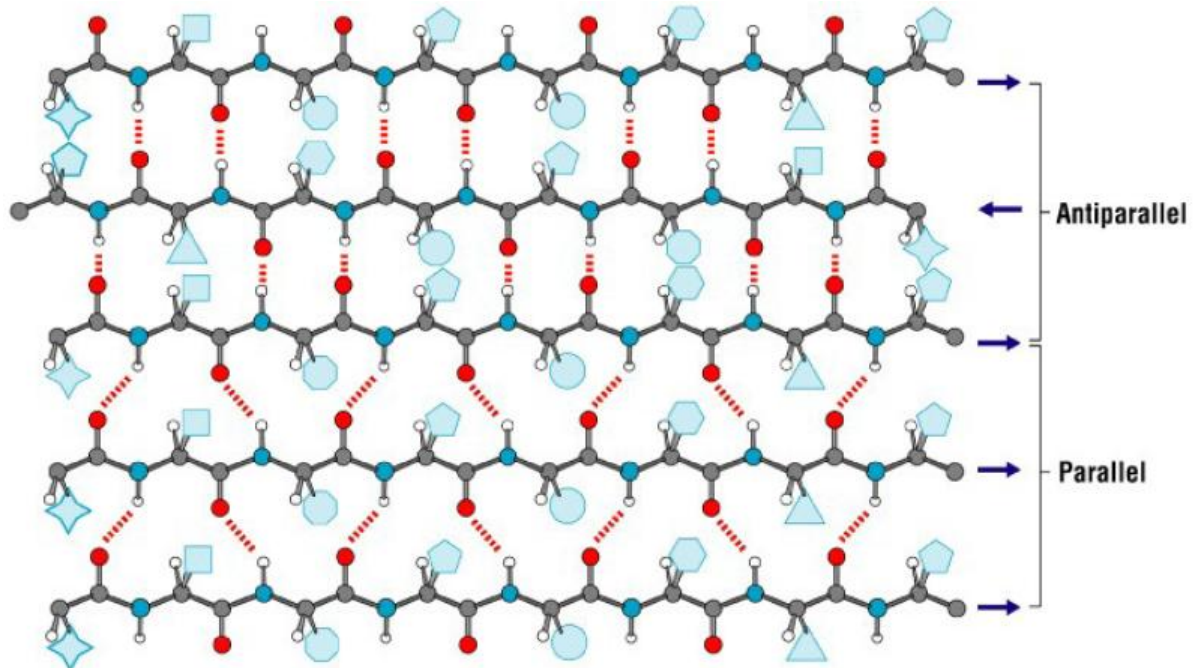
- αλληλεπιδράσεις μικρής εμβέλειας
 - δεσμός υδρογόνου μεταξύ C=O του καταλοίπου n και NH του καταλοίπου $n+4$





β - Πτυχωτή Επιφάνεια

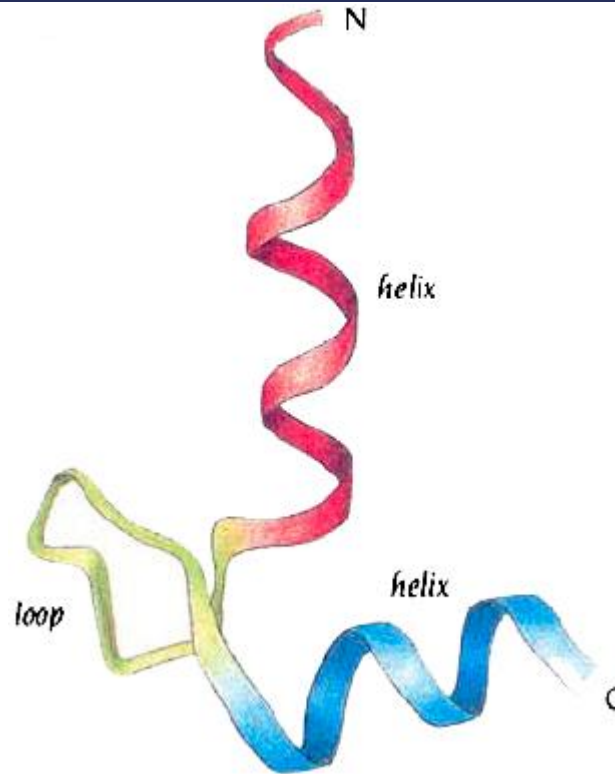
- αλληλεπιδράσεις μακράς εμβέλειας





Στροφές

- Turns and loops



- **Coil** \neq helix, strand, turn

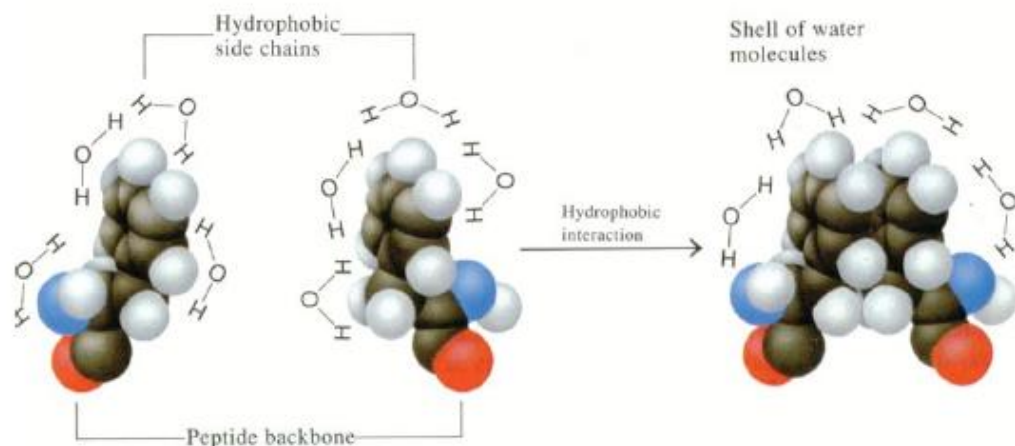


Τι Καθορίζει τη Δομή μιας Πρωτεΐνης;

● αμινοξική ακολουθία (Anfinsen)

– αλληλεπιδράσεις

- ηλεκτροστατικές
- Van der Waals
- δεσμοί υδρογόνου
- υδρόφοβες



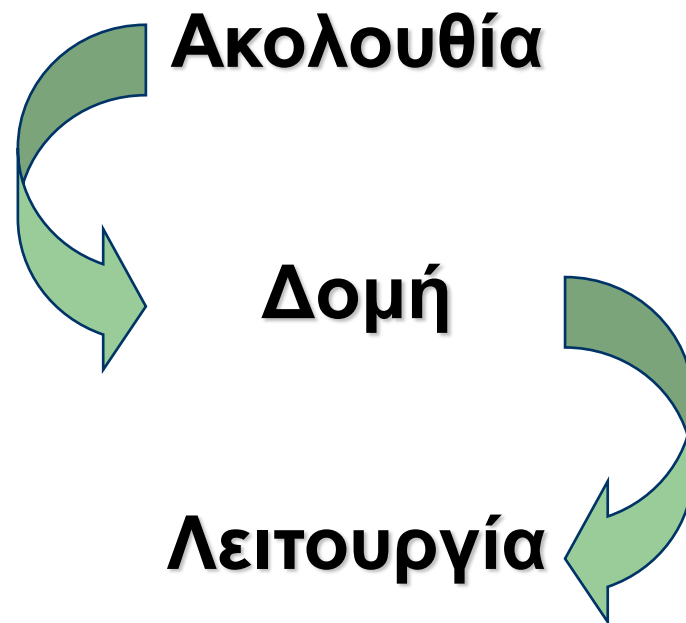
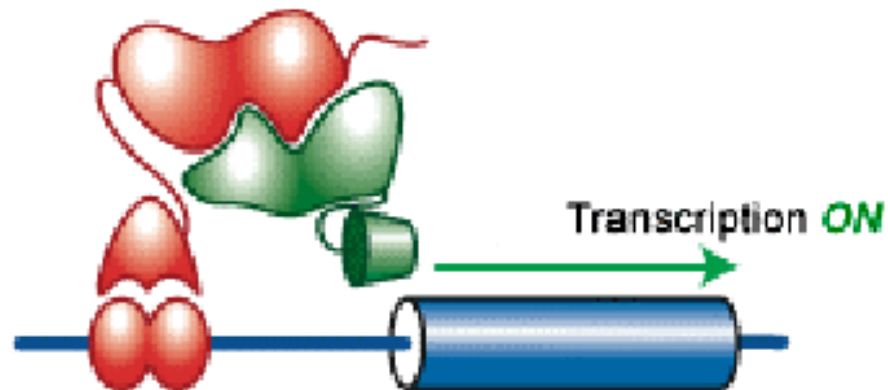
● σφαιρικές υδατοδιαλυτές πρωτεΐνες

- υδρόφοβος πυρήνας / πακετάρισμα ΣΔΔ
- στrofές κυρίως στο εξωτερικό



Τριτοταγής Δομή

- το πρόβλημα της αναδίπλωσης των πρωτεϊνών
- δομικά αυτοτελείς περιοχές (domains)
 - χαρακτηριστική ακολουθία και λειτουργία
 - multidomain proteins
- σχέση δομής – λειτουργίας





Δομική Βιοπληροφορική

- Μοριακή Οπτικοποίηση
- Δομική Σύγκριση
- Υπολογιστικός Προσδιορισμός Δομής
- Μακρομοριακές Προσομοιώσεις



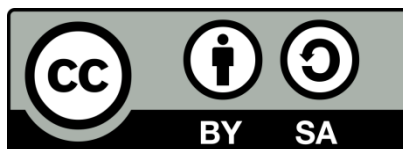
Βιβλιογραφία

- David Mount, "Bioinformatics: Sequence and Genome Analysis", Cold Spring Harbor Laboratory Press; 2nd edition (March 12, 2013)
- Jonathan Pevsner, "Bioinformatics and Functional Genomics", Wiley-Blackwell; 2nd edition (May 4, 2009)
- Andreas D. Baxevanis, B. F. Francis Ouellette, "Bioinformatics: A Practical Guide to the Analysis of Genes and Proteins", Wiley-Interscience; 3rd edition (October 29, 2004)
- Jenny Gu, Philip E. Bourne, "Structural Bioinformatics", Wiley-Blackwell; 2nd edition (March 16, 2009)



Άδειες Χρήσης

- Το παρόν εκπαιδευτικό υλικό υπόκειται σε άδειες χρήσης Creative Commons.
- Για εκπαιδευτικό υλικό, όπως εικόνες, που υπόκειται σε άλλου τύπου άδεια χρήσης, η άδεια χρήσης αναφέρεται ρητώς.





Χρηματοδότηση

- Το παρόν εκπαιδευτικό υλικό έχει αναπτυχθεί στο πλαίσιο του εκπαιδευτικού έργου του διδάσκοντα.
- Το έργο «**Ανοικτά Ακαδημαϊκά Μαθήματα Γεωπονικού Πανεπιστημίου Αθηνών**» έχει χρηματοδοτήσει μόνο την αναδιαμόρφωση του εκπαιδευτικού υλικού.
- Το έργο υλοποιείται στο πλαίσιο του Επιχειρησιακού Προγράμματος «Εκπαίδευση και Δια Βίου Μάθηση» και συγχρηματοδοτείται από την Ευρωπαϊκή Ένωση (Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο) και από εθνικούς πόρους.



Ευρωπαϊκή Ένωση
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο



ΕΠΙΧΕΙΡΗΣΙΑΚΟ ΠΡΟΓΡΑΜΜΑ
ΕΚΠΑΙΔΕΥΣΗ ΚΑΙ ΔΙΑ ΒΙΟΥ ΜΑΘΗΣΗ
επένδυση στην κοινωνία της γνώσης
ΥΠΟΥΡΓΕΙΟ ΠΑΙΔΕΙΑΣ ΚΑΙ ΘΡΗΣΚΕΥΜΑΤΩΝ
ΕΙΔΙΚΗ ΥΠΗΡΕΣΙΑ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ

Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



ΕΣΠΑ
2007-2013
πρόγραμμα για την ανάπτυξη
ΕΥΡΩΠΑΪΚΟ ΚΟΙΝΩΝΙΚΟ ΤΑΜΕΙΟ



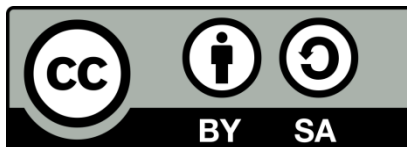
Σημείωμα Αναφοράς

Copyright Γεωπονικό Πανεπιστήμιο Αθηνών 2015. Τμήμα Βιοτεχνολογίας, Θηραίου Τριάς. «Βιοπληροφορική». Έκδοση: 1.0. Αθήνα 2015. Διαθέσιμο από τη δικτυακή διεύθυνση:
<https://mediasrv.aua.gr/eclass/courses/OCDB100/>



Σημείωμα Αδειοδότησης

Το παρόν υλικό διατίθεται με τους όρους της άδειας χρήσης Creative Commons Αναφορά, Παρόμοια Διανομή 4.0 [1] ή μεταγενέστερη, Διεθνής Έκδοση. Εξαιρούνται τα αυτοτελή έργα τρίτων, π.χ. φωτογραφίες, διαγράμματα κ.λ.π., τα οποία εμπεριέχονται σε αυτό και τα οποία αναφέρονται μαζί με τους όρους χρήσης τους στο «Σημείωμα Χρήσης Έργων Τρίτων».



Η άδεια αυτή ανήκει στις άδειες που ακολουθούν τις προδιαγραφές του Ορισμού Ανοικτής Γνώσης [2], είναι ανοικτό πολιτιστικό έργο [3] και για το λόγο αυτό αποτελεί ανοικτό περιεχόμενο [4].

[1] <http://creativecommons.org/licenses/by-sa/4.0/>

[2] <http://opendefinition.org/okd/ellinika/>

[3] <http://freedomdefined.org/Definition/EI>

[4] <http://opendefinition.org/buttons/>



Διατήρηση Σημειωμάτων

Οποιαδήποτε αναπαραγωγή ή διασκευή του υλικού θα πρέπει να συμπεριλαμβάνει:

- το Σημείωμα Αναφοράς
 - το Σημείωμα Αδειοδότησης
 - τη δήλωση Διατήρησης Σημειωμάτων
 - το Σημείωμα Χρήσης Έργων Τρίτων (εφόσον υπάρχει)
- μαζί με τους συνοδευόμενους υπερσυνδέσμους.