



MODELOWANIE MOLEKULARNE | OBLICZENIOWA BIOLOGIA STRUKTURALNA I

KRYSTIANA ANNA KRZYŚKO
KRZYSKO@BIOEXPLORATORIUM.PL
Nowy budynek 2.39a

NAZEWNICTWO AMINOKWASÓW

alanina	A, Ala		
arginina	R, Arg		
asparagina	N, Asn	fenyloalanina	F, Phe
kw.asparaginowy	D, Asp	prolina	P, Pro
cysteina	C, Cys	seryna	S, Ser
glutamina	Q, Gln	treonina	T, Thr
kw.glutaminowy	E, Glu	tryptofan	W, Trp
glicyna	G, Gly	tyrozyna	Y, Tyr
histydyna	H, His	walina	V, Val
izoleucyna	I, Ile		
leucyna	L, Leu		
lizyna	K, Lys		
metionina	M, Met		

KLASYFIKACJA AMINOKWASÓW

Ze względu na polarność rodnika (R) aa białkowe dzieli się na:

- ◆aa z R niepolarnym: G, A, V, L, I, P, F,
- ◆aa z R polarnym niejonizującym: S, T, Y, C, M, Q, N, W,
- ◆aa z R polarnym jonizującym:
 - kwaśne: D, E,
 - zasadowe: K, R, H.

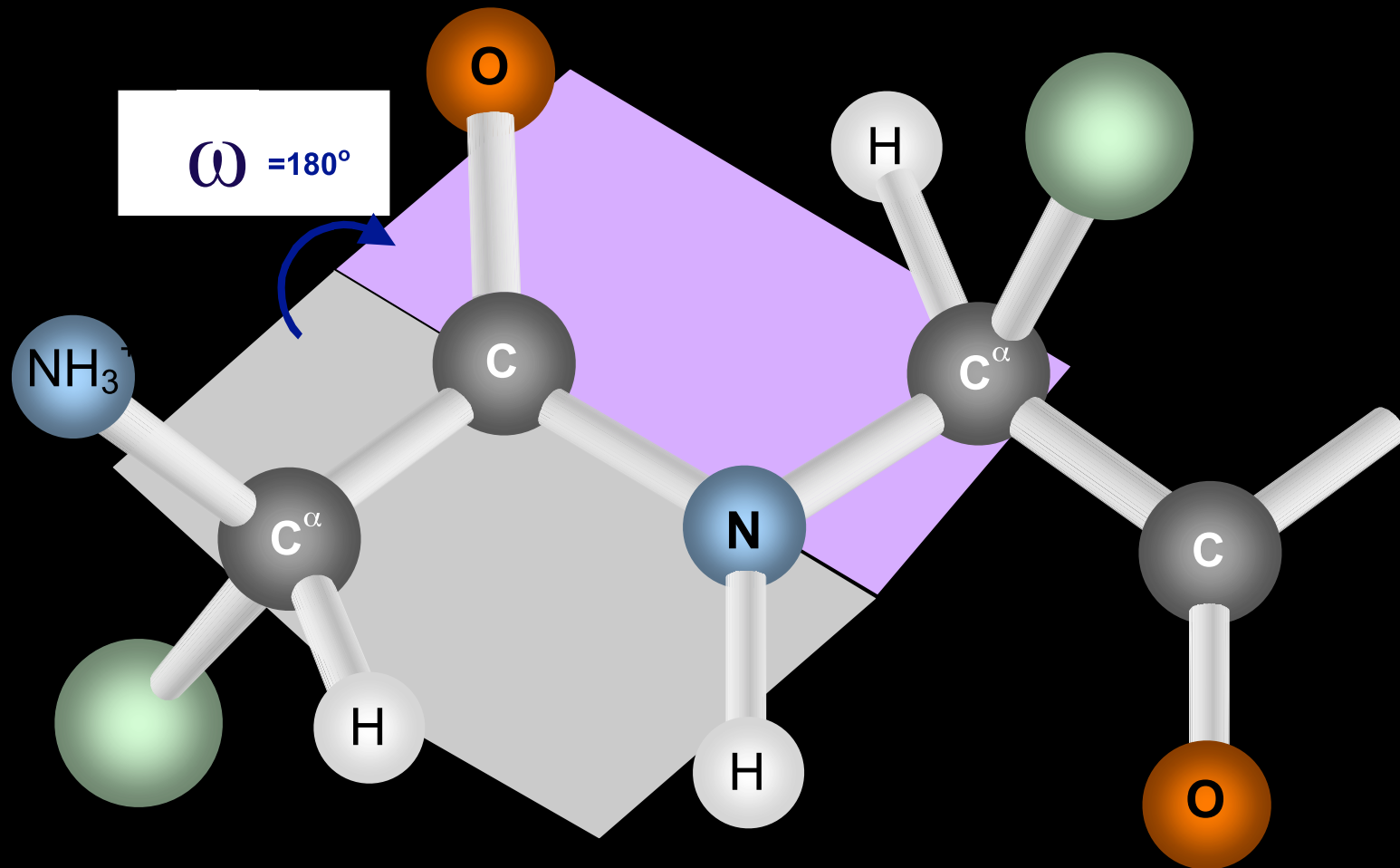
Ze względu na budowę chemiczną R:

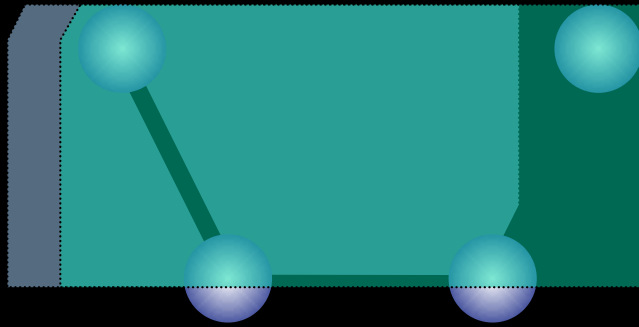
- ◆aa z R alifatycznym: G, A, V, L, I,
- ◆aa z R zawierającym grupę hydroksylową: S, T, Y,
- ◆aa z R zawierającym atom siarki: C, M,
- ◆aa z R zawierającym grupy kwasowe lub ich amidy: D, E, N, Q,
- ◆aa z R zawierającym grupy zasadowe: K, R, H,
- ◆aa z R zawierającym pierścień aromatyczny: F, Y, W, H,
- ◆aa o charakterze iminokwasów: P.

Ze względu na zdolność organizmu ludzkiego do ich syntezy:

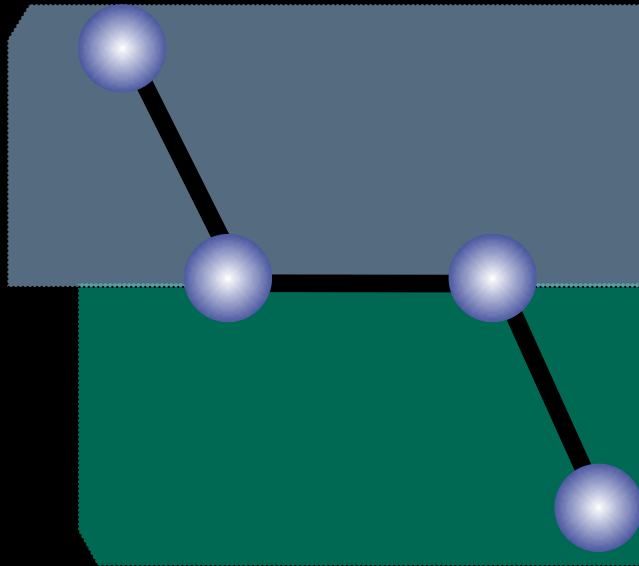
- ◆aa endogenne są syntetyzowane przez ludzkie hepatocyty i nie wymagają dostarczenia ich z pokarmem -należą do nich: G, A, P, S, Y, D, E, N, Q.
- ◆aa egzogenne (niezbędne, niezastąpione) nie są syntetyzowane w ludzkim ustroju, a ich obecność i odpowiednie stężenie w białkach spożywczych decyduje o ich wartości odżywczej - są to: V, L, I, F, T, M, W, K, R, H (histydyna jest niezbędna dla dzieci do lat 12, ale nie jest niezbędna dla dorosłych).

KĄT TORSYJNY ω KONFORMACJA TRANS

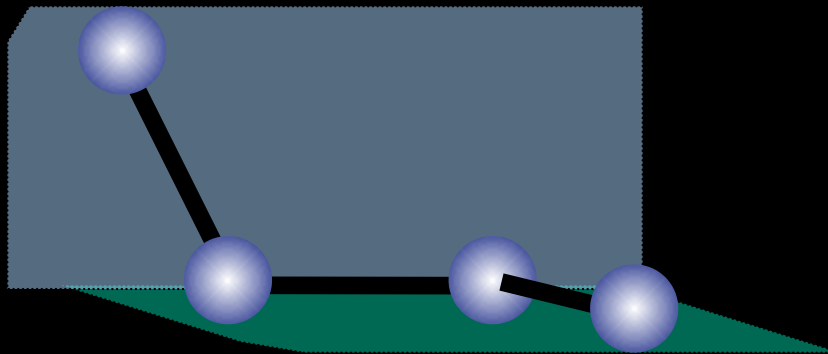




0°

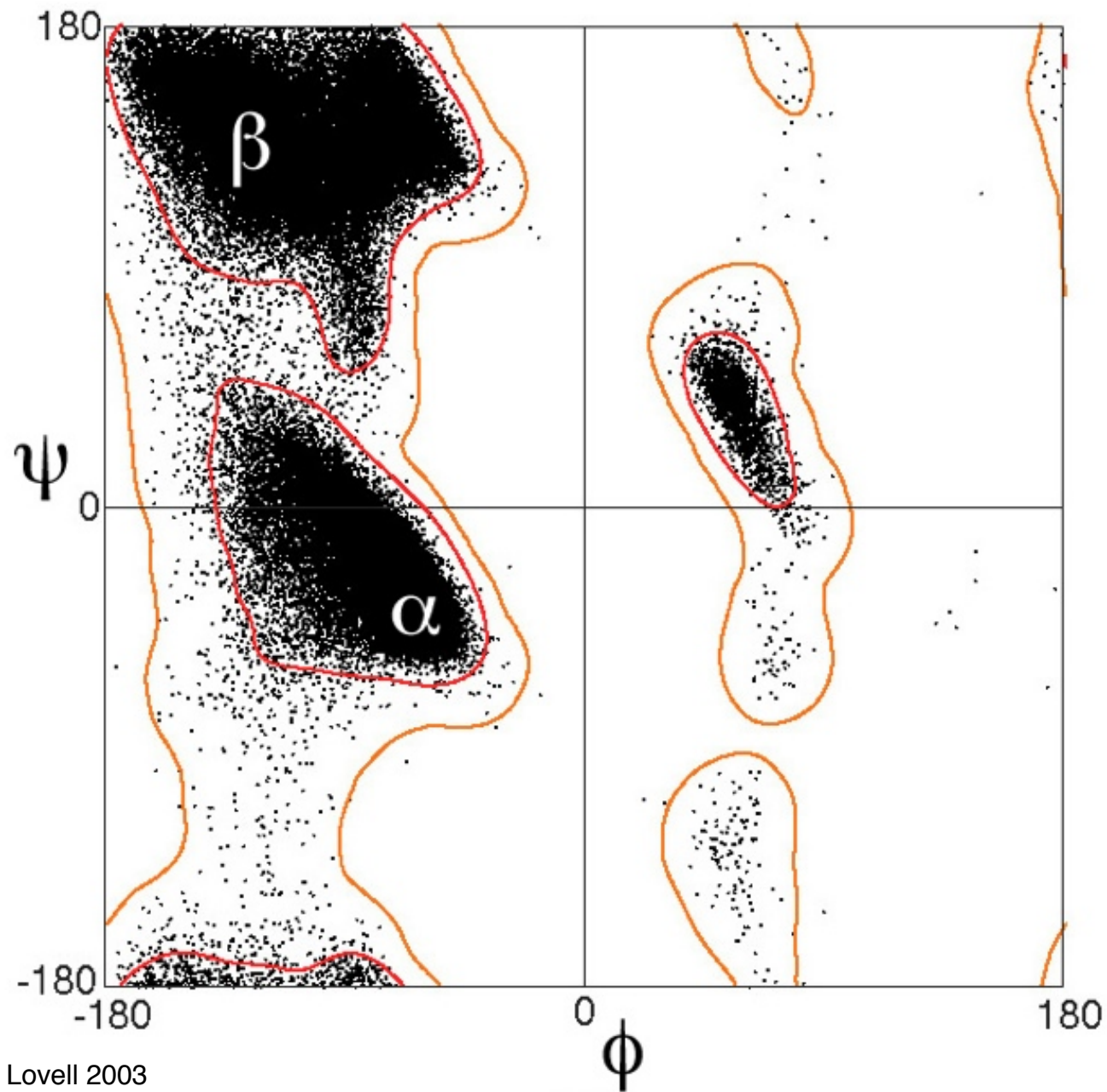


180°



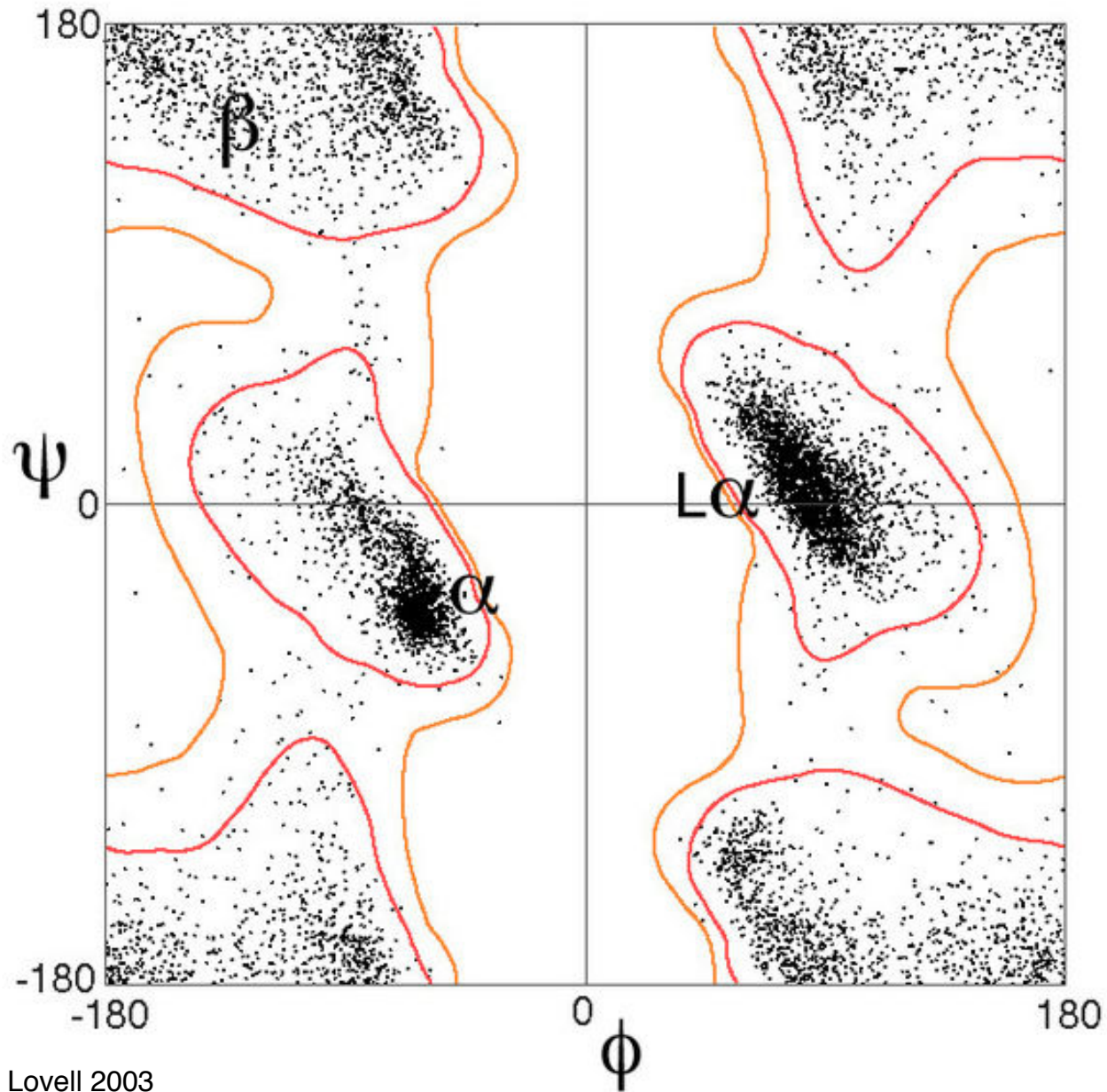
90°

ogólny



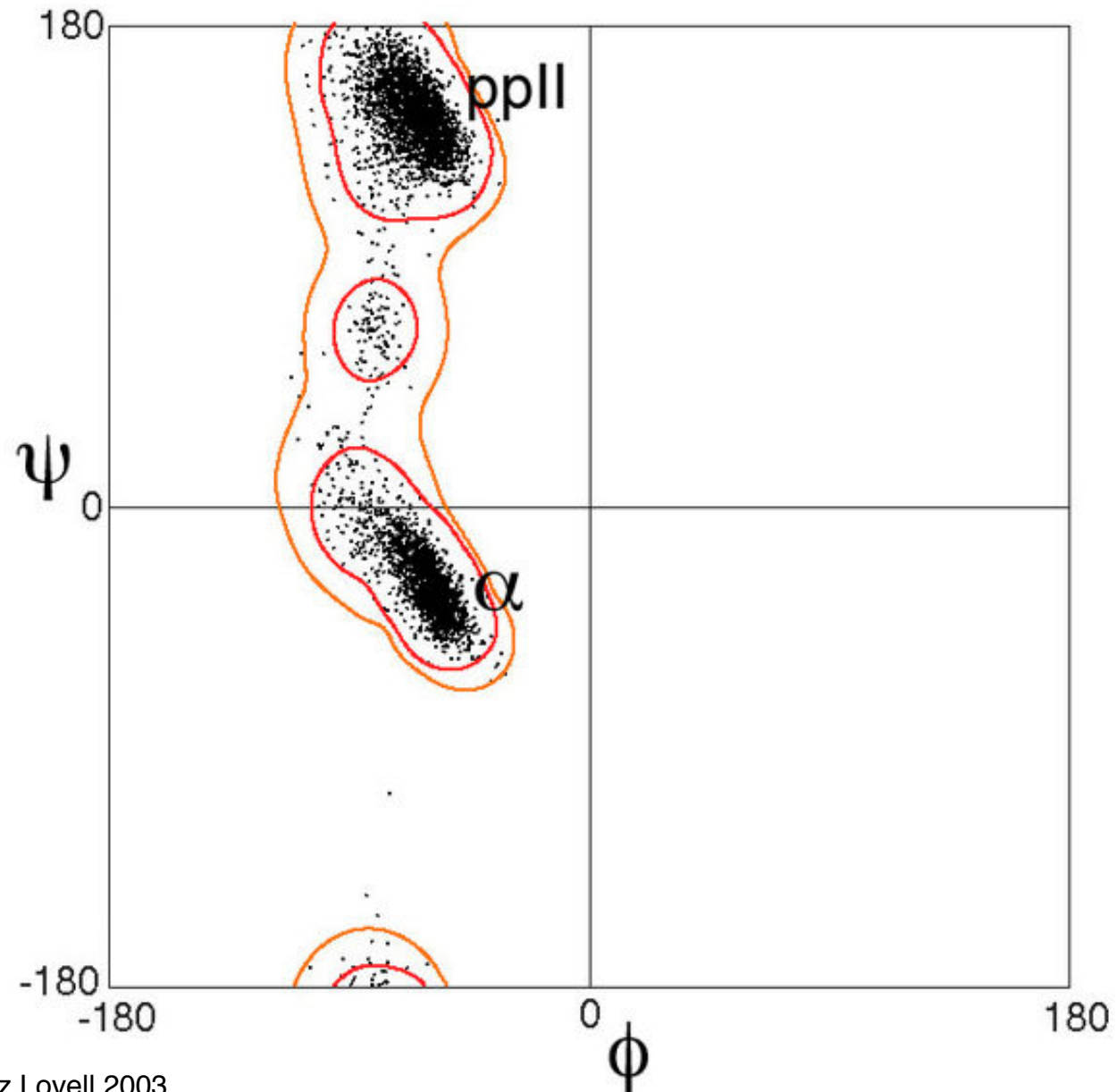
dane z Lovell 2003

dla Gly

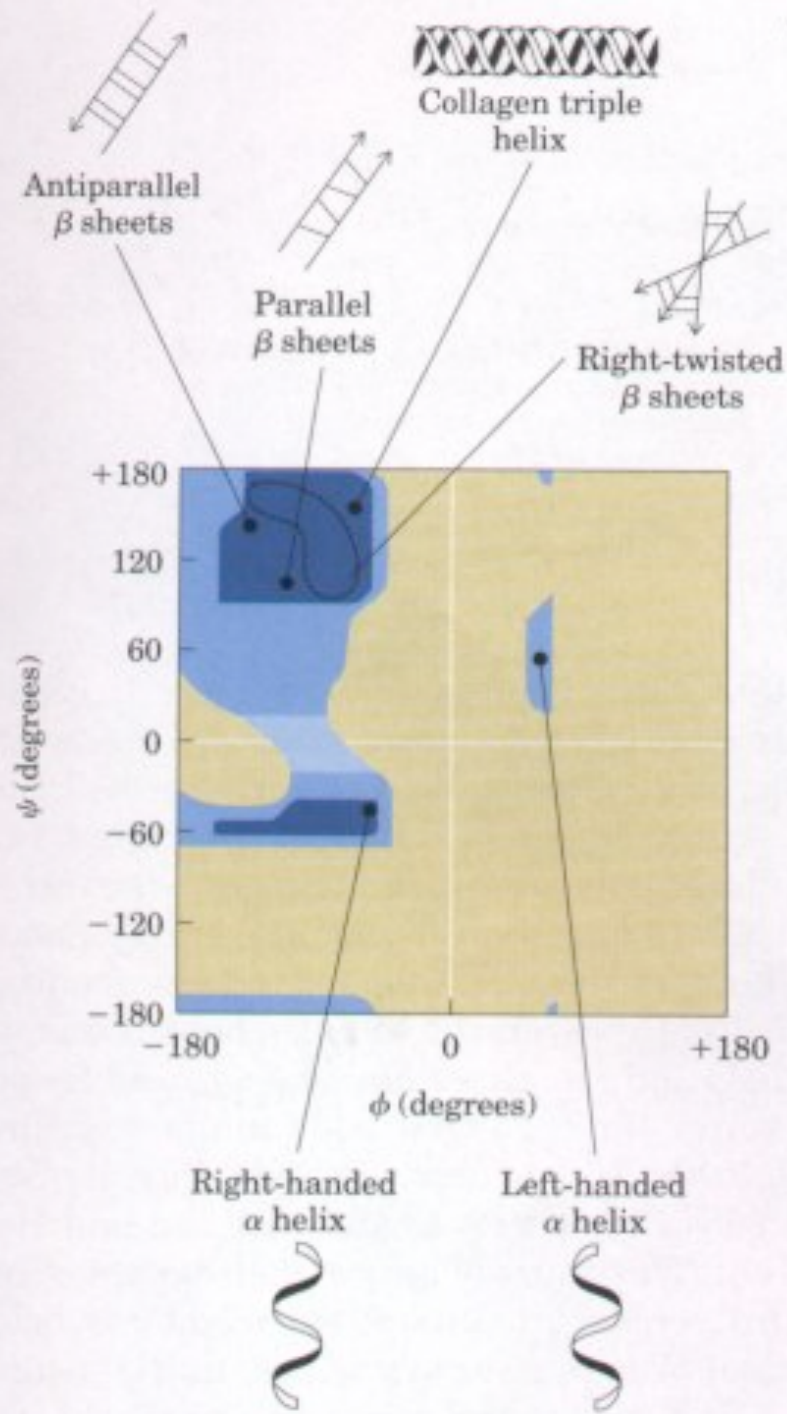


dane z Lovell 2003

dla Pro



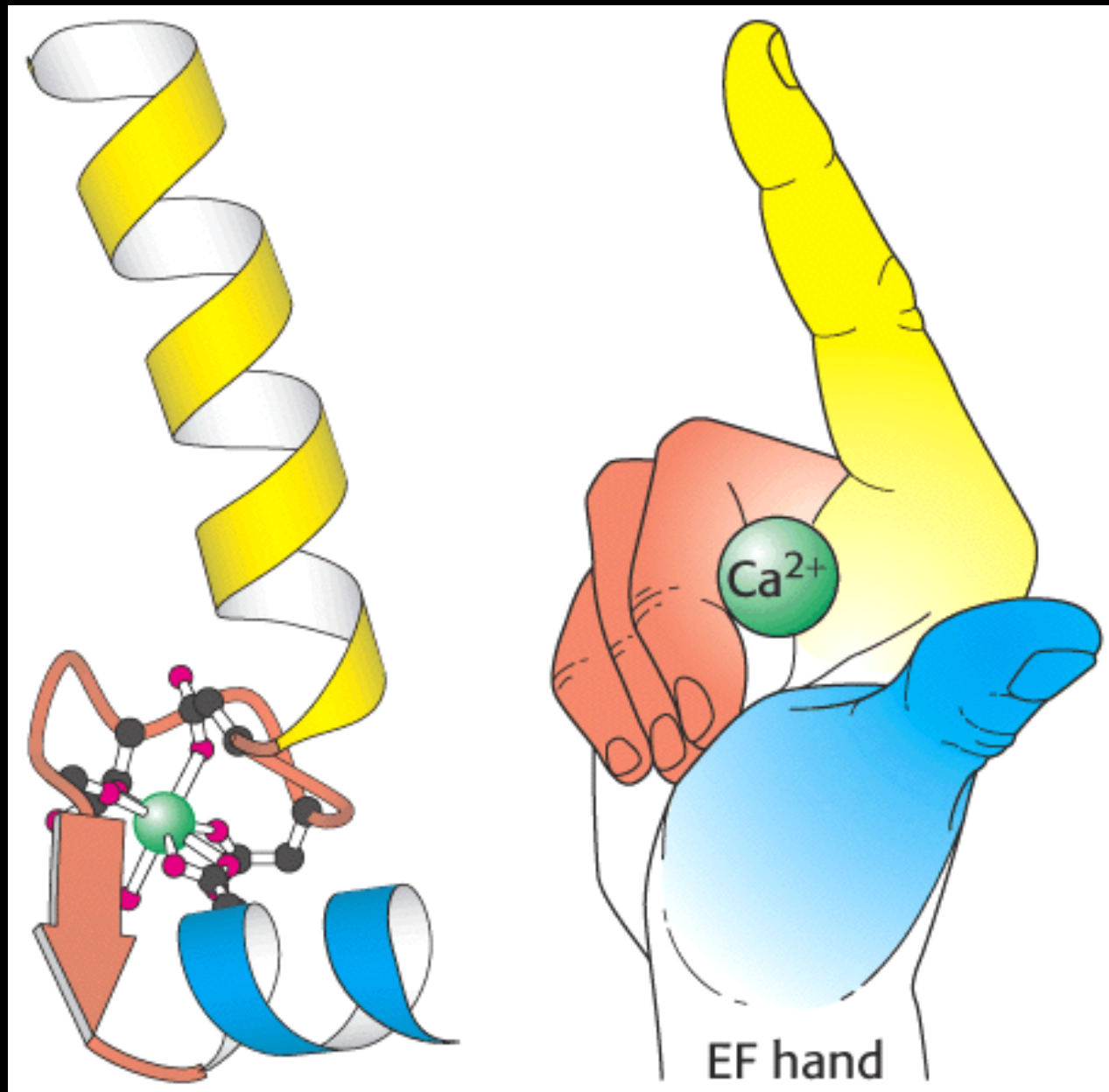
dane z Lovell 2003



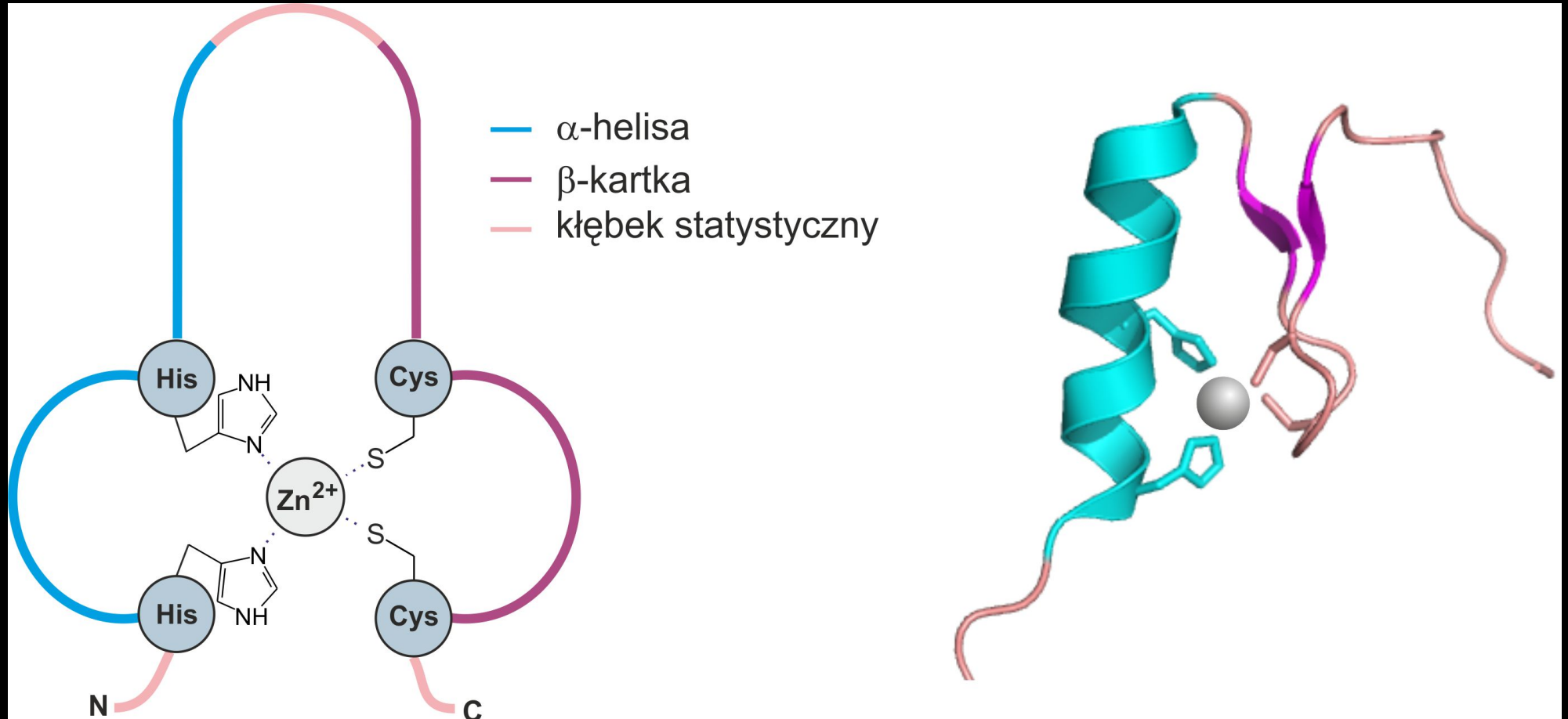
WZMACNIACZE I ŁAMACZE STRUKTUR

	Wzmacniacze	Łamacze
α - helisa	M L E C A	P G Y T S
β - harmonijka równoległa	V I F M L Y	P G D E A N S K
β - harmonijka	Q T R H W C	
kłębek, zwrot	G P D N S Y, naładowane	

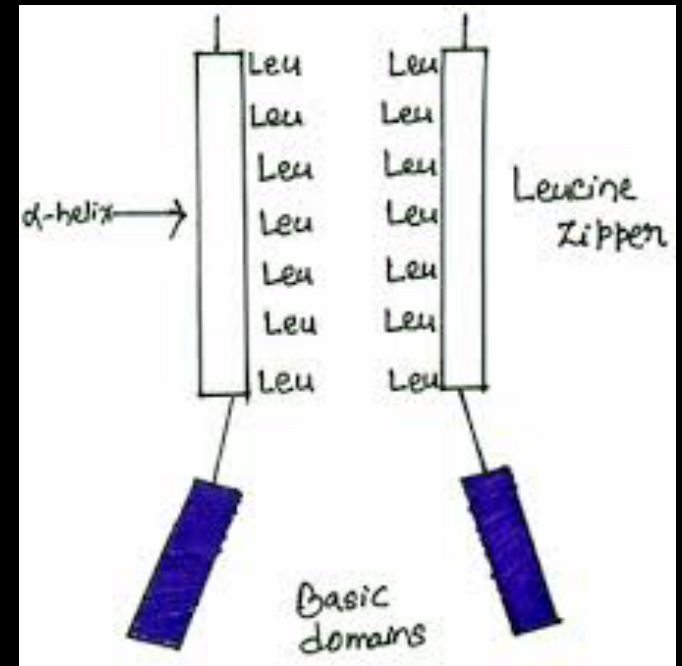
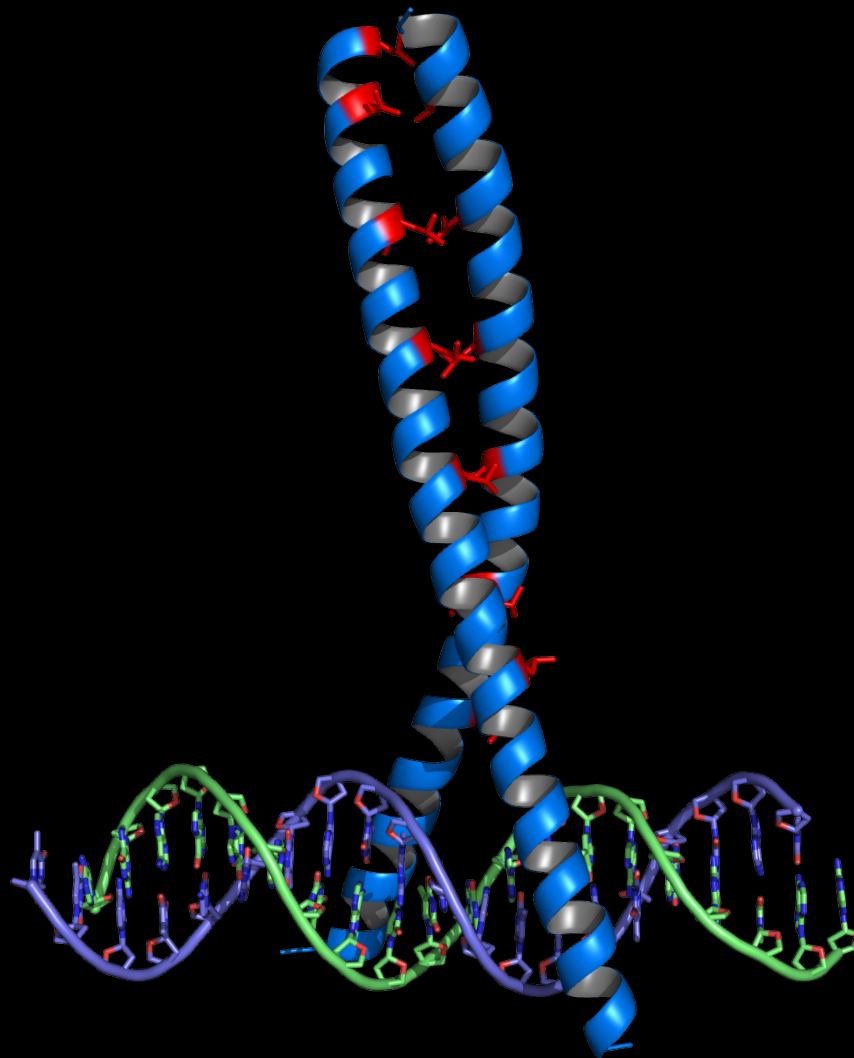
EF HAND



PALEC CYNKOWY



ZAMEK LEUCYNOWY



MOTYWY WIAŻĄCE DNA

(a) Helix-turn-helix motif

(b) Zinc finger motif

(c) Leucine zipper motif

(d) Helix-loop-helix motif

Phage λ repressor bound to DNA

Zinc finger

Zinc ions "Finger"

Helix-turn-helix

Dimer-binding helix Turn Major groove of DNA DNA-binding helices

Leucine zipper

Zipper Leucine DNA-binding helix

Helix-loop-helix

Helix Loop DNA-binding helix

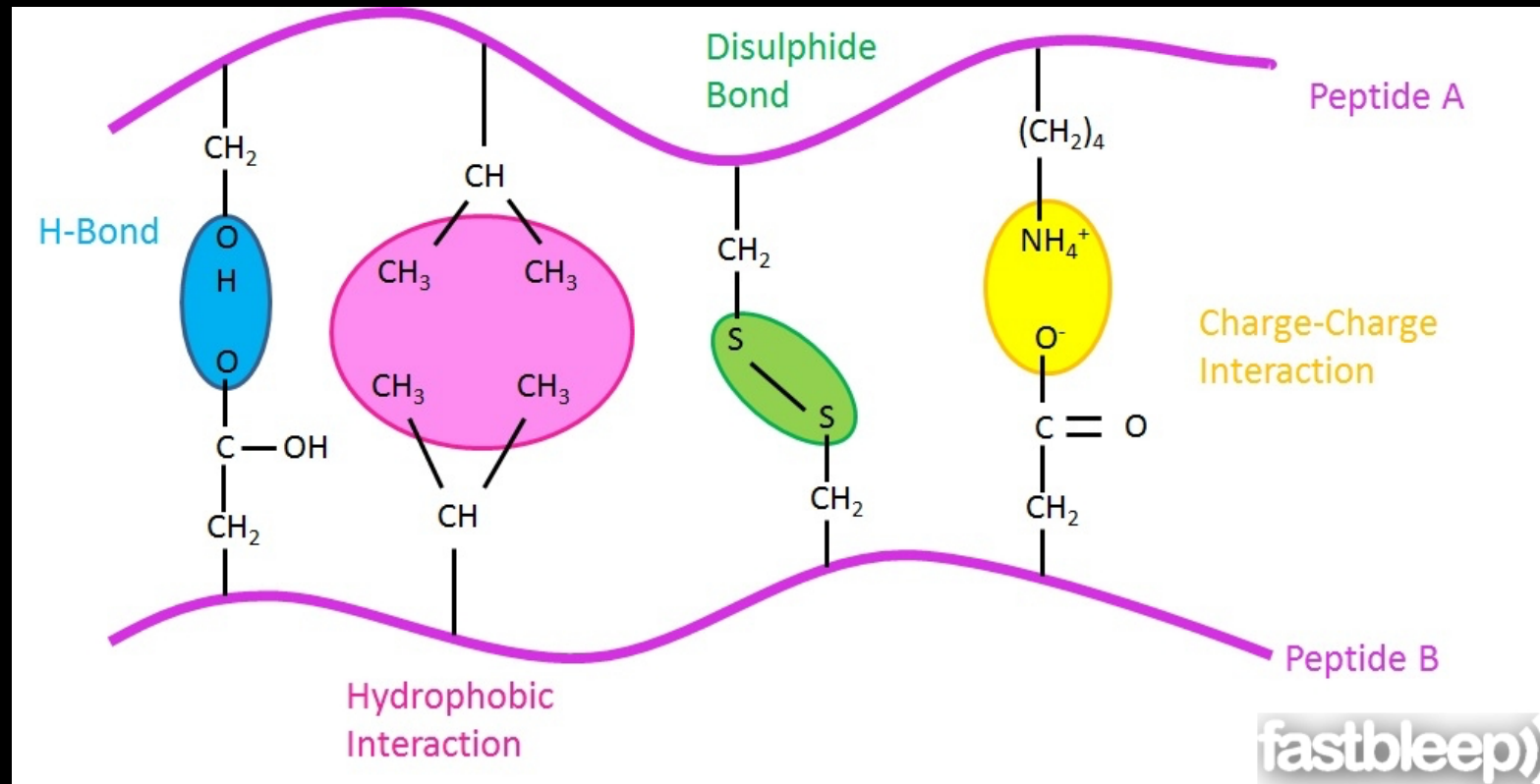
Wiązania wiążące

Siła wiązania (S-S) = 250 kJ/mol

Siła wiązania jonowego = 20 kJ/mol

Siła wiązania wodorowego = 7 - 40 kJ/mol

Siła wiązania van der Waalsa = 1,9 kJ/mol



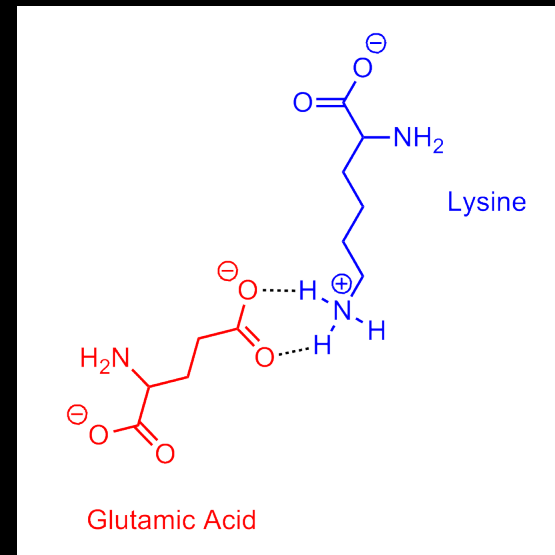
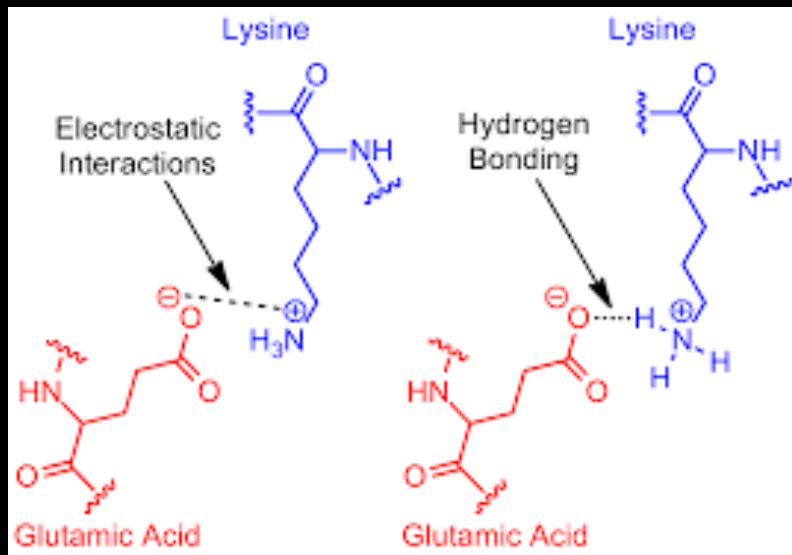
Wiązania wiążące

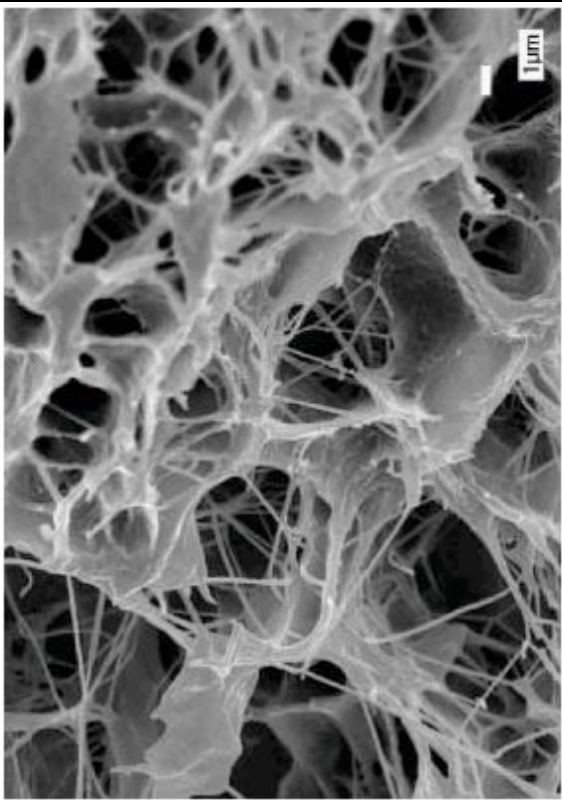
Siła wiązania (S-S) = 250 kJ/mol

Siła wiązania jonowego = 20 kJ/mol

Siła wiązania wodorowego = 7 - 40 kJ/mol

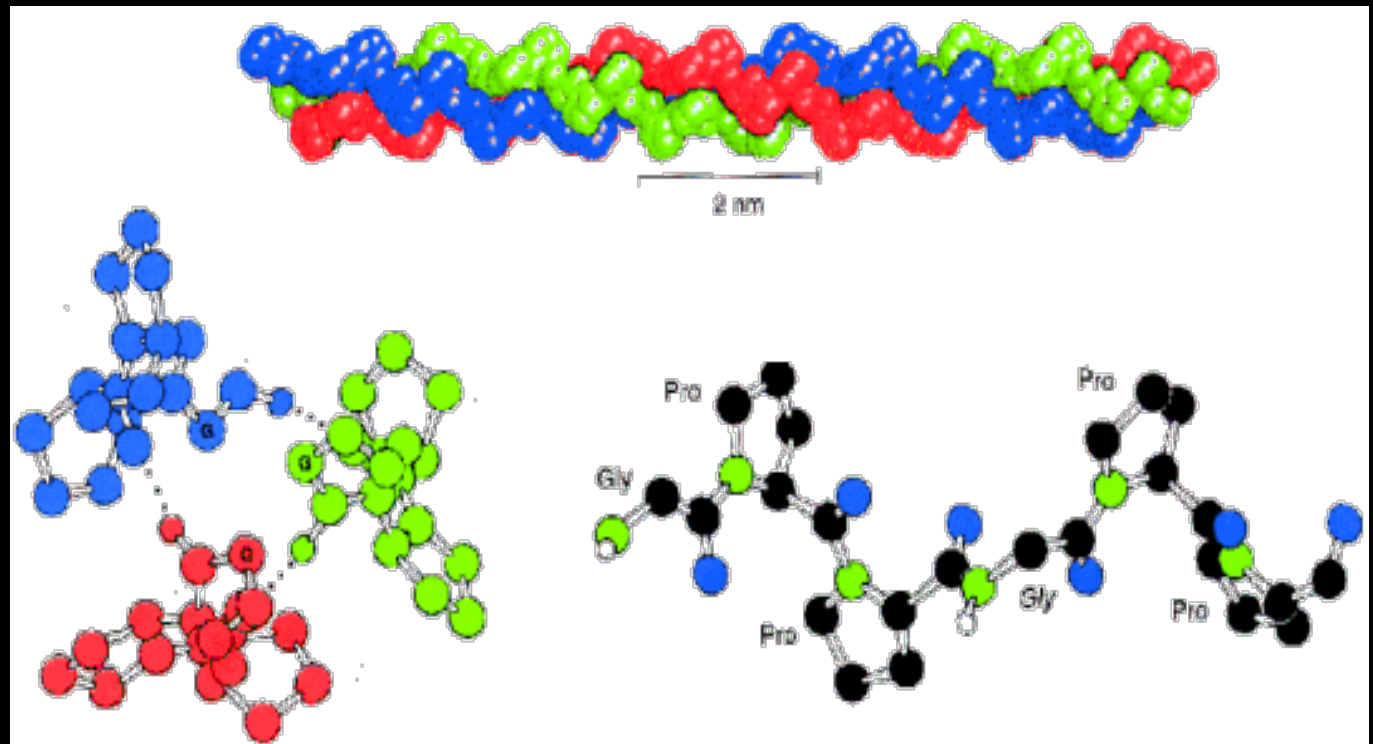
Siła wiązania van der Waalsa = 1,9 kJ/mol



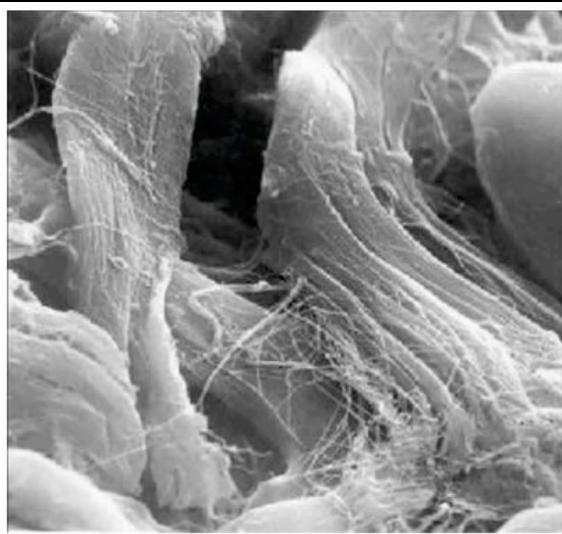


kolagen

superhelisa, potrójna helisa



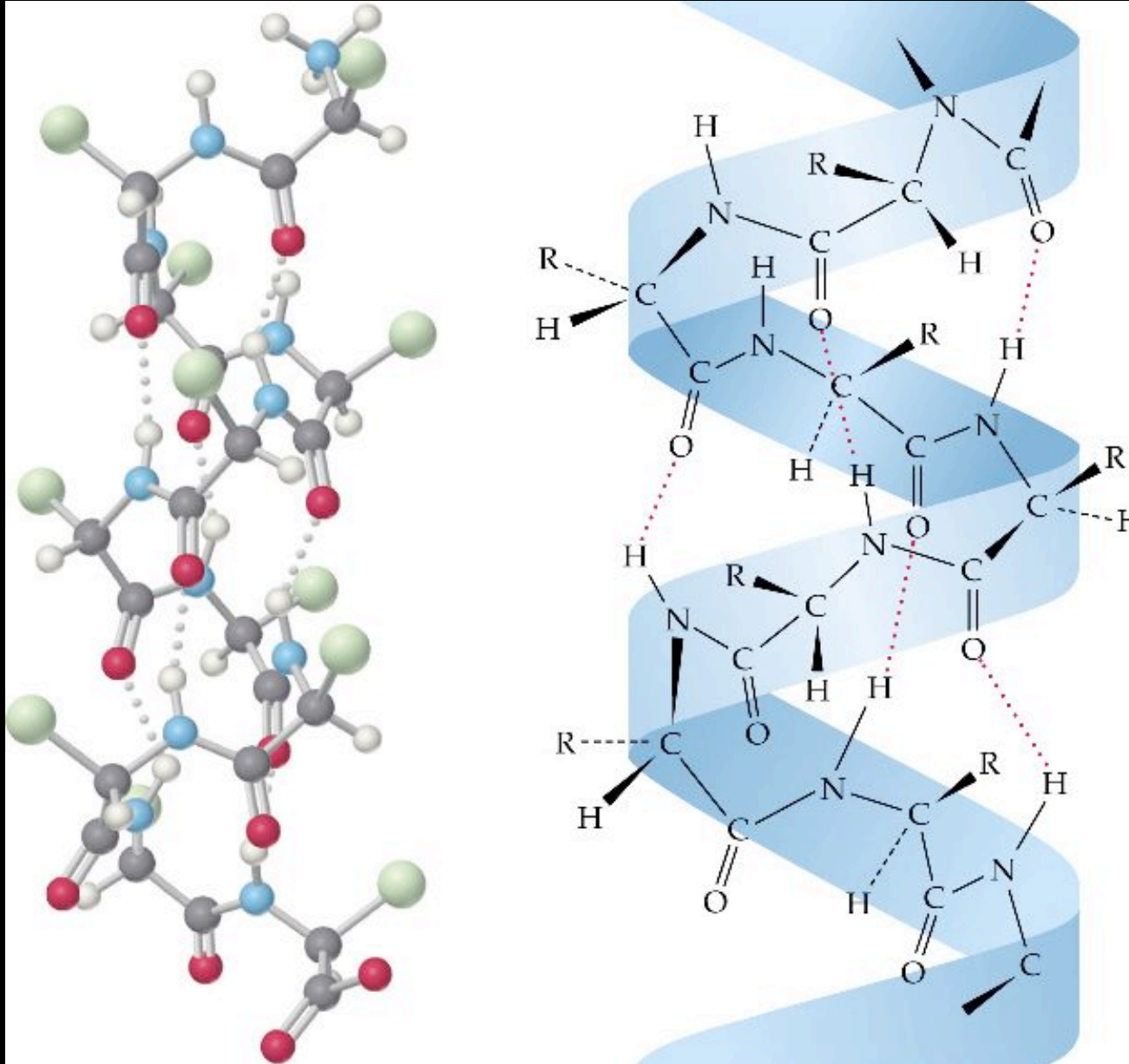
co 3-ci aminokwas to Gly



Włókna ludzkiego kolagenu w powiększeniu

(<http://www.egoendermologia.pl/>)

α -keratyna



jest bogata w hydrofobowe aminokwasy: Ala, Val, Leu, Ile, Met i Phe

zbudowana jest z 2 równoległych helis skręconych w lewą stronę

Jedwabna nić

