MODELOWANIE MOLEKULARNE I OBLICZENIOWA BIOLOGIA STRUKTURALNA I

KRYSTIANA ANNA KRZYŚKO
KRZYSKO@BIOEXPLORATORIUM.PL

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.

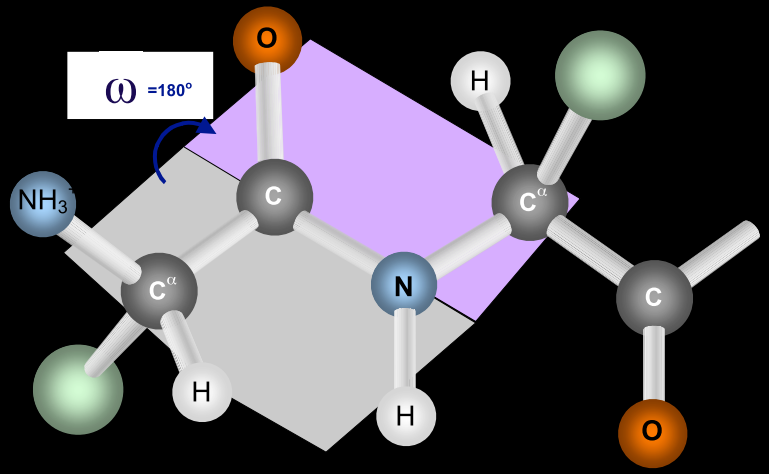
Ze względu na budowę chemiczną R:

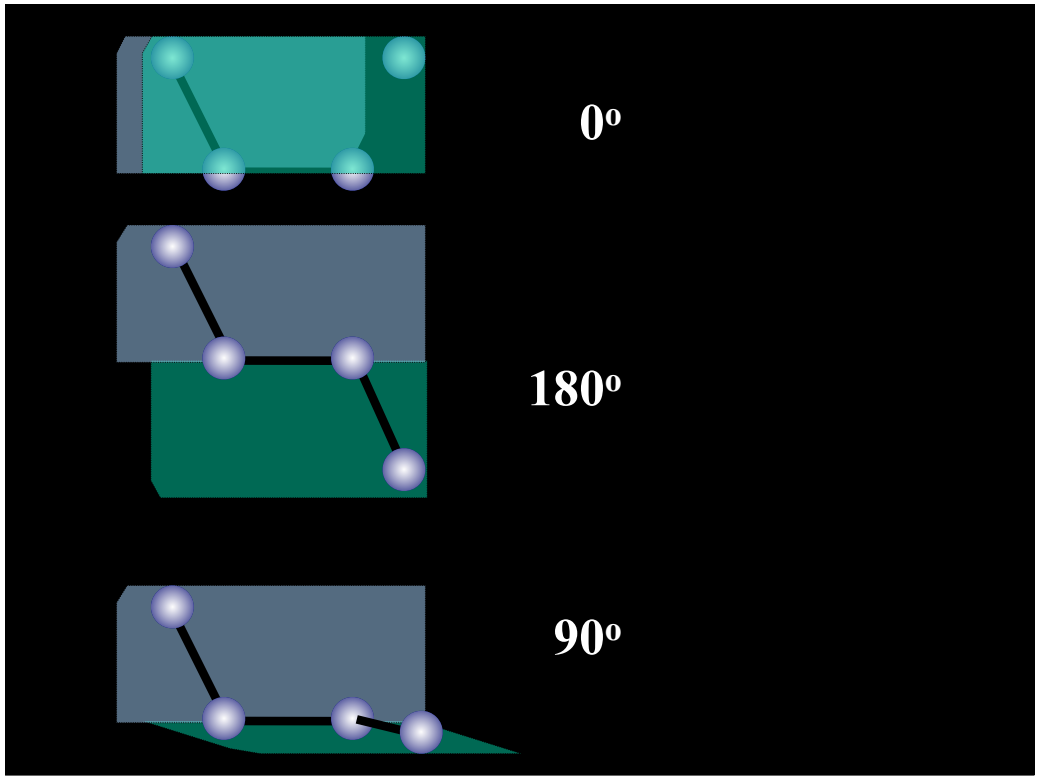
- ✦aa z R alifatycznym: G, A, V, L, I,
- ✦aa z R zawierającym grupę hydroksylową: S, T, Y,
- ✦aa z R zawierającym atom siarki: C, M,
- ✦aa z R zawierającym grupy kwasowe lub ich amidy: D, E, N, Q,
- ✦aa z R zawierającym grupy zasadowe: K, R, H,
- ✦aa z R zawierającym pierścień aromatyczny: F, Y, W, H,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

Ze względu na zdolność organizmu ludzkiego do ich syntezy:

- ✦aa endogenne są syntetyzowane przez ludzkie hepatocyty i nie wymagają dostarczania 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°

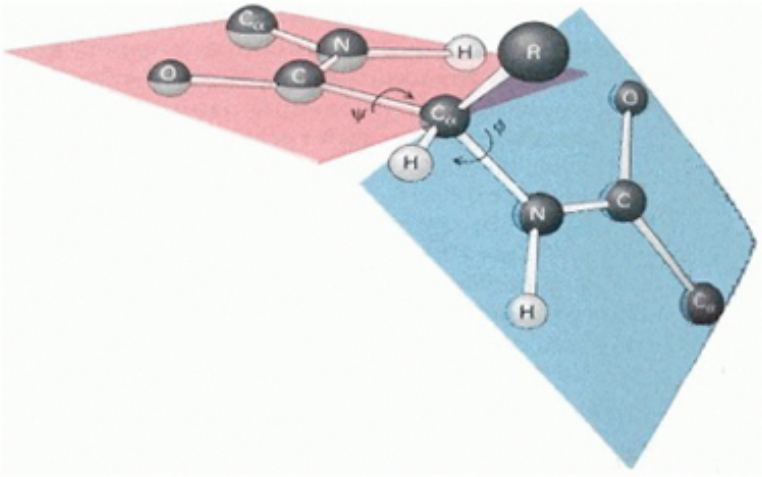
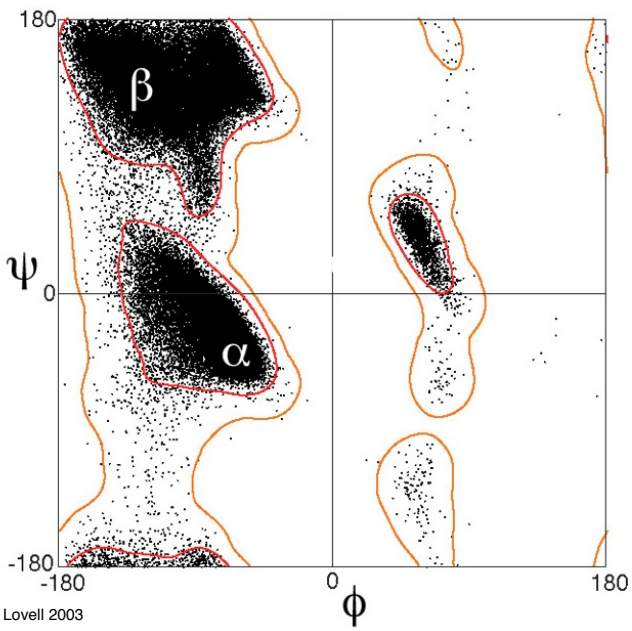


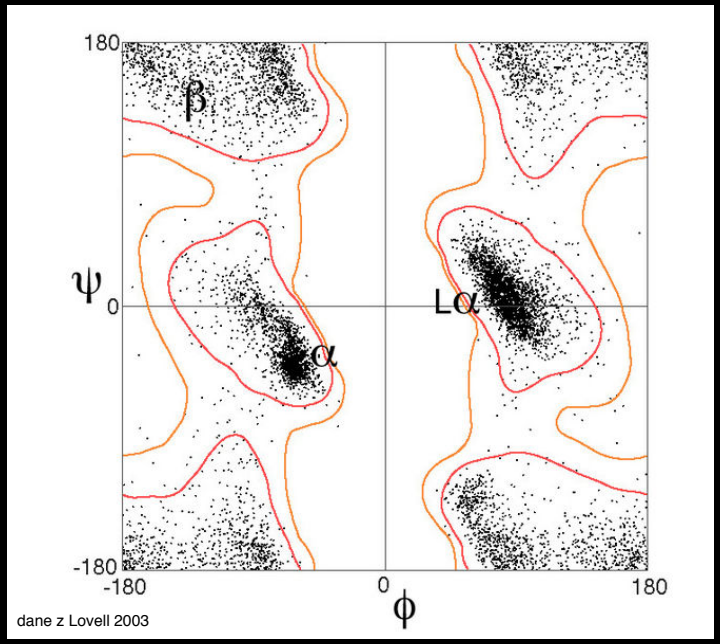
Fig. 3 Torsion angles, Ψ *(C -- Cα) and* Φ *(Cα -- N)*

ogólny



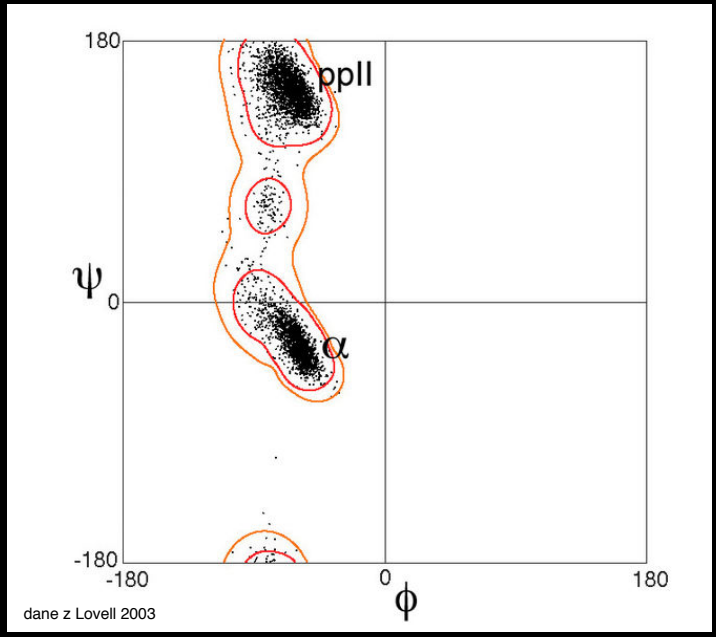
dane z Lovell 2003

dla Gly

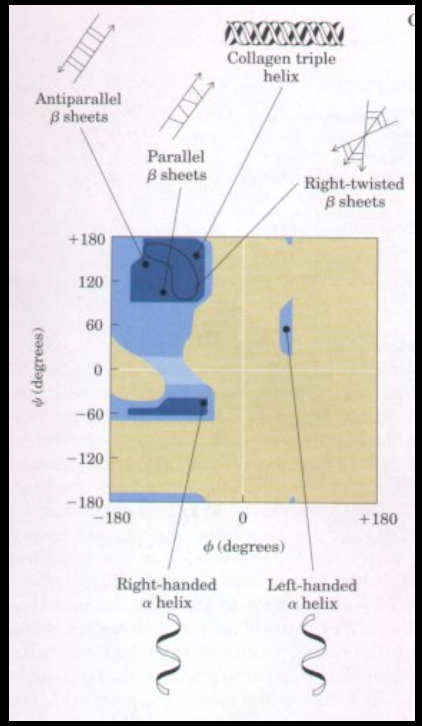


dane z Lovell 2003

dla Pro



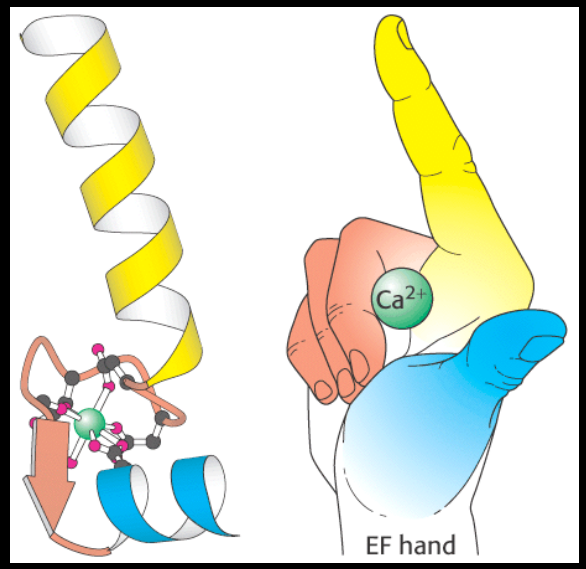
dane z Lovell 2003


Collagen triple helix
Antiparallel β sheets
Parallel β sheets
Right-twisted β sheets
+180
120
60
0
−60
−120
−180
ψ (degrees)
−180
0
+180
ϕ (degrees)
Right-handed α helix
Left-handed α helix

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 antyrównoległa	Q T R H W C	
kłębek, zwrot	**G P** D N S Y, naładowane	

EF HAND

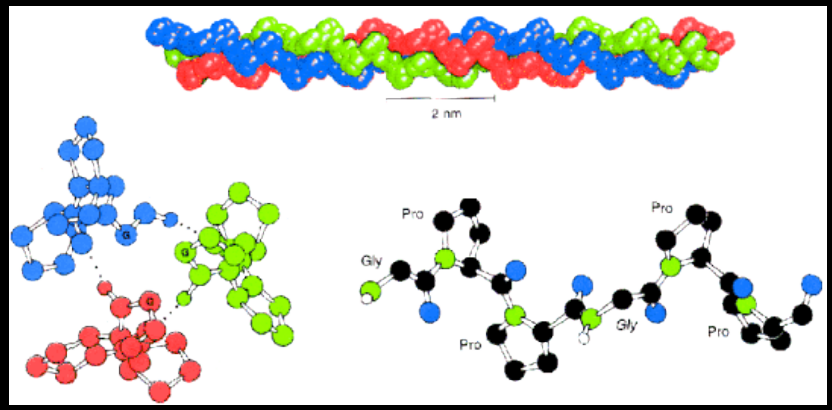


Wiązania wiążące

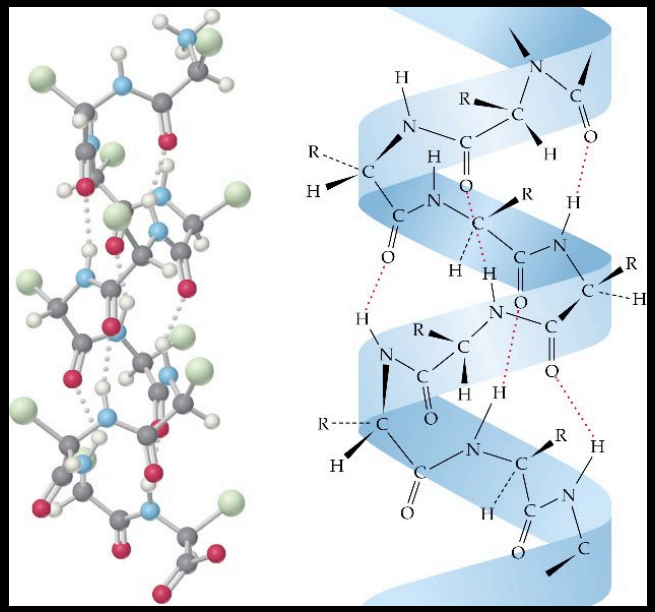
Siła wiązania (S–S) = 250 kJ/mol

Siła wiązania jonowego = 20 kJ/mol
Siła wiązania wodorowego = 7 – 40 kJ/mol
Siła wiązania van der Waalsa = 1,9 kJ/mol

kolagen



α-keratyna



Jedwabna nić

