

PROTEIN STRUCTURE

Obiettivo: annotazione strutturale e funzionale delle proteine, per farlo devo passare attraverso la risoluzione della loro struttura tridimensionale

Proteina

eteropolimero lineare di residui amminoisidici che hanno una struttura tale da determinare una funzione precisa e sono frutto dell'EVOLUZIONE

Struttura:

1°, 2°, 3°, 4°

- angoli diedri
- alpha-eliche
- beta-foglietti

RAMACHANDRAN PLOT:

metodo di visualizzazione delle combinazioni degli angoli diedri

→ identifica quelle ammissibili

LOOPS

molto difficili da catturare (TAGLIATI IN POB)

Partendo dalla famiglia:

1. Pulisco dal POB
2. Calcolo gli angoli
3. Creo il plot

Elementi di struttura SuperSecondaria

arrangiamento di due o più strutture secondarie → favoriti energeticamente e base di molte strutture tridimensionali

SE IN UNA STRUTTURA RISOLTA UN RESIDUO RISULTA ESSERE FUORI POSTO ALLORA È DOVUTO AD UN ERRORE O AD UNA MUTAZIONE

PROTEIN FOLDING

Definizione:

l'arrangiamento globulare e compatto della catena polipeptidica. Il modo in cui si ripiega la proteina è determinato dalla sequenza primaria. Tale orientamento punta a impacchettare i residui idrofobici all'interno del core della proteina

energia libera di Gibbs

$$\Delta G = \Delta H - T\Delta S$$

voglio trovare il minimo assoluto

Effetto idrofobico:

Considero il grado di disordine residui idrofobici + acqua = diminuisce l'entropia dell'acqua

IL PROBLEMA:

Il folding di una proteina è marginalmente stabile poiché il grado di ΔG è dell'ordine di poche Kcal/mol

Ad oggi è impossibile ripiegare le proteine, ma è possibile ricreare il modello strutturale