

UNIVERZITA KOMENSKÉHO V BRATISLAVE  
FAKULTA MATEMATIKY, FYZIKY A INFORMATIKY

ŠTÁTNICE Z BIOINFORMATIKY  
VYPRACOVANÉ TÉMY

Študijný program: Bioinformatika  
Študijný odbor: Bioinformatika

Bratislava, 2016  
Prví Bioinformatici

# Obsah

<b>1</b>	<b>Algebra</b>	<b>1</b>
1.1	Vektorové priestory, lineárne zobrazenia . . . . .	2
1.1.1	priestor, podpriestor, lineárna závislosť, báza a dimenzia . . . . .	2
1.1.2	Steinitzova veta . . . . .	2
1.1.3	súčty podpriestorov . . . . .	2
1.1.4	lineárne zobrazenia, kompozícia lineárnych zobrazení, inverzné lineárne zobrazenia, matica lineárneho zobrazenia, jadro a obraz lineárneho zobrazenia . . . . .	2
1.2	Matice a riešenia lineárnych rovníc nad poľom $F$ . . . . .	2
1.2.1	matice, operácie s maticami (násobenie, sčítanie), elementárne riadkové operácie . . . . .	2
1.2.2	trojuholníkový a redukovaný trojuholníkový tvar matice . . . . .	2
1.2.3	systémy lineárnych rovníc nad poľom $F$ . . . . .	2
1.2.4	množina riešení homogénnych a nehomogénnych systémov line- árnych rovníc, existencia a tvary riešení . . . . .	2
1.3	Determinanty . . . . .	2
1.3.1	Determinant matice . . . . .	2
1.3.2	Vlastnosti determinantov . . . . .	2
1.3.3	Výpočty determinantov a ich použitie pri riešení lineárnych rov- níc a hľadanií inverznej matice . . . . .	2
<b>2</b>	<b>Biochémia</b>	<b>3</b>
2.1	Chémia ako logický základ biologického fenoménu . . . . .	3
2.1.1	Základné vlastnosti živých systémov . . . . .	3
2.1.2	Biomolekuly . . . . .	3
2.1.3	Vlastnosti biomolekúl . . . . .	3
<b>3</b>		<b>8</b>
<b>4</b>		<b>9</b>

**5**

**10**

**6**

**11**

**7**

**12**

**8**

**13**

**9**

**14**

**10**

**15**



# Kapitola 1

## Algebra

### 1.1 Vektorové priestory, lineárne zobrazenia

1.1.1 priestor, podpriestor, lineárna závislosť, báza a dimenzia

1.1.2 Steinitzova veta

1.1.3 súčty podpriestorov

1.1.4 lineárne zobrazenia, kompozícia lineárnych zobrazení, inverzné lineárne zobrazenia, matica lineárneho zobrazenia, jadro a obraz lineárneho zobrazenia

### 1.2 Matice a riešenia lineárnych rovníc nad poľom $F$

1.2.1 matice, operácie s maticami (násobenie, sčítanie), elementárne riadkové operácie

1.2.2 trojuholníkový a redukovaný trojuholníkový tvar matice

1.2.3 systémy lineárnych rovníc nad poľom  $F$

1.2.4 množina riešení homogénnych a nehomogénnych systémov lineárnych rovníc, existencia a tvary riešení

### 1.3 Determinanty

1.3.1 Determinant matice

1.3.2 Vlastnosti determinantov

1.3.3 Výpočty determinantov a ich použitie pri riešení lineárnych rovníc a hľadani inverznej matice

# Kapitola 2

## Biochémia

### 2.1 Chémia ako logický základ biologického fenoménu

Prezentácia 1

#### 2.1.1 Základné vlastnosti živých systémov

Zložité a organizované Bio štruktúry majú funkčný význam Aktívne zapojené do premeny energie Schopnosť replikácie Chemický základ

#### 2.1.2 Biomolekuly

HOCN – schopnosť vytvárať kovalentné väzby cez e<sup>-</sup> páry → rôzne štruktúry

#### 2.1.3 Vlastnosti biomolekúl

Štruktúrna polarita (napr. 5' → 3') Informatívnosť (napr. DNA, polypeptidy) Trojrozmerná štruktúra Vlastnosti vody Vysoká hodnota teploty topenia a varu, výparného tepla, povrchového napätia Polarita ← Lomená štruktúra Tvorba vodíkových väzieb Solvatačné vlastnosti Polárne látky → vodíkové väzby Nepochárne → hydrofóbne interakcie Typy a význam slabých interakcií v biologických štruktúrach Slabé interakcie udržiavajú 3D štruktúru a určujú interakcie Napr. biomolekulárne rozpoznávanie Obmedzené vhodné environmentálne podmienky Van der Waalsove Vodíkové Iónové Hydrofóbne Hydrofóbne interakcie. Disperzia lipidov → usporiadávajú okolitú H<sub>2</sub>O Lipidy sa zoskupujú → entropia systému rastie, výhodnejší stav Micely → hydrofóbne konce idú dnu, entropia systému vyššia

2. Aminokyseliny a proteíny. Všeobecný vzorec AK

klasifikácia AK D, L izoméria rozdelenie na základe chem vlastností side chain náboj schopnosť viazať H Kyslá/zásaditá Nepochárne – hydrofóbne Polárne – hydrofilné

vzorke AK Prezentácia 1, str 37, 38 Tvorba disulfidovej väzby optická aktivita Schopnosť otáčať rovinu polarizovaného svetla – napr. Vlnenie fotónu ide zhora dole → zľava doprava Všetky AK okrem glycínu L a D aminokyseliny Prez. 1, str 43, 44 spektroskopické vlastnosti AK Absorbujú v infrač. oblasti Trp a tyr, menej Phe v UV Absorbcia pri 280nm sa používa pri detekcii proteínov

acidobázické vlastnosti AK Pri nízkom pH je veľa  $H^+$ , AK stráca čiastočne negatívny náboj a ostane s kladným. Pri vysokom pH je veľa  $OH^-$  → bude mať záporný náboj Zwitterióny, amfotérny charakter AK, Pri neutrálnom pH má oba náboje → Zwitterión/Amfión Vie reagovať s kys. aj zásadami izoelektrický bod izoelektrický bod – pH, keď sa AK mení z – na 0 alebo z + na 0.  $pI = (pK_A \text{ kyslého} + pK_A \text{ zásaditého}) / 2$ . Obyčajne 9 a 2  $pI = \text{average of } pK_A\text{s of functional groups}$  štruktúra a vlastnosti peptidovej väzby Prez 1, str 46 Odchádza/prichádza  $H_2O$   $N^+$ ,  $O^-$  medzi jednoduchou a dvojitou trans 6 atómov v rovine – planárne usporiadanie Trojrozmerná štruktúra proteínov – primárna, sekundárna ( $\alpha$ -helix,  $\beta$ -skladaný list,  $\beta$ -otáčka), terciárna, kvartérna, väzby (interakcie) a funkčné skupiny uplatňujúce sa pri jednotlivých štruktúrach Primárna poradie AK, kovalentné peptidové väzby Sekundárna ako sa skladajú na seba, (základná štruktúra, nie zvyšky), vodíkové väzby medzi CO a NH  $\alpha$ -helix (pravotočivý) Väzba o 4 zvyšky dopredu  $\beta$ -skladaný list paralelný, antiparalelný Úplne rozvinutý reťazec Väzby aj medzi rozdielnymi reťazcami  $\beta$ -otáčka Zmena smeru peptidového reťazcu Väzba o 3 zvyšky ďalej prolín, glycín Terciárna Priestorová štruktúra, interakcie vzdialených skupín, ako sa folds skladajú na seba, vodíkové väzby, Van der Waals, hydrofóbny obal, disulfidový mostík medzi bočnými reťazcami Daná primárnou štruktúrou kvartérna medzi rôznymi polypeptidmi podjednotky sa skladajú do mérov – diméry, tetraméry, multiméry → počty polypeptidových reťazcov Homo/hetero multimérne – rovnaké/rôzne reťazce TODO: Kedy sa rozpadajú? Zmena pH, teplota, atď? Cysteín – disulfidový mostík

Rozdelenie proteínov podľa štruktúry a rozpustnosti (fibrilárne, globulárne, membránové proteíny) Fibrilárne pevné, reťazce väčšinou paralelné s jednou osou nerozpustné, štruktúrna funkcia keratíny, kolagén, fibroín Prez 1, str 73 Globulárne hydrofilné von, hydrofóbne dnu Flexibilné časti, štruktúry nie sú statické (PARTAAY) mioglobín, cytochróm c, lyzozým, ribonukleáza Membránové bakteriorodospín Biologická funkcia proteínov, natívna konformácia, denaturácia, renaturácia. Enzymová katalýza Transportná, zásobná – hemoglobín( $O_2$ ), sérumalbumín (MK), Ovalbumín, Kazeín (N), Ferritín (Fe) Koordinovaný pohyb – Aktín, myozín mechanická podpora – kolagén, keratín Imunita nervové impulzy regulácia rastu, diferenciácia

natívna konformácia – správne zložený proteín. Aktívna forma. Chyby na hocikto-rej úrovni vedú ku chorobám Denaturácia unfolded, neaktívny pH, teplota, chemikálie, org. rozpúšťadlá, detergenty, močovina, enzýmy Neovplyvňuje primárnu štruktúru. vratná/nevratná Renaturácia Nie vždy sa poskladá správne Chaperone – proteín, čo

skladá správne proteíny Prirodzene neusporiadané proteíny → viac funkcií, nemávajú hydrofóbne jadro

3. Sacharidy Rozdelenie sacharidov, aldózy, ketózy aldózy – O na začiatku ketózy – O v strede mono, oligo, poly lineárne, rozvetvené

Vzorce (lineárne – Fischerove, cyklické – Haworthove): glukóza, manóza, galaktóza, ribóza. Pojmy: konfigurácia, konformácia, enantiomér, epimér, diastereomér, poloacetál, poloketál, mutarotácia,  $\alpha$ -,  $\beta$ -anoméry. Vznik glykozidovej väzby. Deriváty sacharidov (kyseliny, alkoholy, deoxysacharidy – deoxyribóza, estery sacharidov, aminosacharidy – glukozamín, acetály, ketály, glykozidy). Disacharidy (redukujúce, neredukujúce disacharidy, príklady – laktóza, sacharóza, trehalóza). Štruktúrne polysacharidy – celulóza, chitín (väzby, štruktúra). Zásobné polysacharidy – škrob, glykogén (väzby, štruktúra). Heteropolysacharidy – peptidoglykán, hyaluronát, proteoglykány (základná charakteristika). Sacharidy ako informačné molekuly. Lektíny

4. Lipidy a biologické membrány. Funkcie lipidov. Štruktúra a vlastnosti mastných kyselín (kyselina palmitová, steárová, olejová, linolová, linolénová). Triacylglyceroly (tuky, oleje), glycerofosfolipidy (fosfatidyletanolamín, fosfatidylcholín, fosfatidylserín, fosfatidylglycerol, fosfatidylinozitol, kardiolipín), sfingolipidy (sfingomyelíny, cerebrozidy, ceramidy, gangliozydy), vosky, cholesterol – štruktúra a funkcia. Amfipatický charakter niektorých lipidov, agregované formy lipidov – micely, dvojvrstvy. Princíp samovoľného vzniku lipidových agregátov. Biomembrány, membránové proteíny, model tekutej mozaiky. Úloha cholesterolu pri ovplyvňovaní fluidity membrán. Transport cez membrány (pasívny, aktívny). Na<sup>+</sup>/K<sup>+</sup> pumpa.

5. Enzýmy. Význam enzýmovej katalýzy. Pojmy – holoenzým, apoenzým, kofaktor, koenzým, prostetická skupina. Klasifikácia enzýmov. Aktívne miesto, špecifita enzýmov. Jednotka enzýmovej aktivity – katal. Mechanizmus účinku enzýmov – teória komplementarity, teória indukovaného prispôsobenia. Termodynamické hľadisko priebehu enzymaticky katalyzovaných reakcií, aktivačná energia, prechodný stav. Kinetické hľadisko priebehu enzymaticky katalyzovaných reakcií, faktory ovplyvňujúce rýchlosť enzýmovej reakcie, Michaelis – Mentenovej rovnica, parametre  $K_m$  a  $V_{max}$ ; inhibícia enzýmov – ireverzibilná, reverzibilná – kompetitívna, nekompetitívna. Regulácia enzýmov – alosterickou modifikáciou, kovalentnou modifikáciou, regulačnými proteínmi, proteolytickým štiepením (zymogény).

6. Základy metabolizmu. Zdroj a premeny energie v biosfére. I. a II. zákon termodynamický. Chemická energia – entalpia, voľná (Gibbsova) energia, entropia. Endergonické, exergonické reakcie. Podmienka samovoľnosti priebehu chemických dejov. Význam prenášačov energie, úloha, vznik (substrátová fosforylácia, oxidačná fosforylácia, fotofosforylácia) a premeny ATP. Katabolické a anabolické metabolické dráhy, ich význam. Energetické vzťahy medzi katabolickými a anabolickými dráhami. Oxidácia biomolekúl.



7. Metabolizmus sacharidov. Glukóza ako zdroj metabolickej energie. Glykolýza – význam, lokalizácia, 2 fázy glykolýzy, jednotlivé reakcie, medziprodukty a enzýmy glykolýzy. Spotreba a vznik ATP počas glykolýzy, substrátová fosforylácia. Osud pyruvátu a regenerácia  $\text{NAD}^+$ , anaeróbne – mliečne kvasenie, alkoholové kvasenie, aeróbne – v dýchacom reťazci. Glukoneogenéza – význam, substráty, tri unikátne glukoneogenetické kroky (4 enzýmy), lokalizácia.

Coriho cyklus, prenos laktátu zo svalu do pečene, vznik glukózy z laktátu procesom glukoneogenézy. Pentózová dráha: význam, východisková zlúčenina, vznik NADPH, ribulóza-5-fosfátu, reakcie katalyzované dehydrogenázami, izomerázou, epimerázou, transaldolázami, transketolázami.

8. Citrátový cyklus. Glyoxylátový cyklus. Vznik acetyl-koenzýmu A z kyseliny pyrohroznovej. Citrátový cyklus – zdroj energie a biosyntetických prekursorov, bunková lokalizácia cyklu. Reakcie citrátového cyklu, jednotlivé medziprodukty a enzýmy. Vznik redukovaných koenzýmov. Tvorba GTP – substrátová fosforylácia. Amfibolický charakter citrátového cyklu, anaplerotické reakcie (pyruvátkarboxyláza). Glyoxylátový cyklus – význam pre rastliny a baktérie, lokalizácia (spolupráca glyoxyzómov a mitochondrií), enzýmy.

9. Oxidačná fosforylácia. Štruktúra a funkcia mitochondrií. Zloženie a funkcia dýchacieho reťazca, prenášače elektrónov – cytochrómy, bielkoviny s nehemovo viazaným železom, ubiquinón, flavoproteíny. Zdroj elektrónov vstupujúcich do dýchacieho reťazca. Prenos elektrónov v dýchacom reťazci (komplexy I, II, III, IV, cyt c, ubiquinón). Vznik protónového gradientu. Využitie protónového gradientu na syntézu ATP, enzým ATP-syntáza. Chemiosmotická teória. Ďalšie možnosti využitia protónového gradientu – termogenéza, pohyb baktérií, transport metabolitov. 10. Fotosyntéza. Fotofosforylácia ako súčasť fotosyntézy. Štruktúra a funkcia chloroplastov. Pigmenty a ich úloha v procese fotosyntézy. Fotochemické reakčné centrum a deje, ktoré v ňom prebiehajú. Prenos elektrónov fotosystémami I a II. Necyklická a cyklická fotofosforylácia. Fotolýza vody. Vznik NADPH a ATP. Spoločné a rozdielne znaky fotofosforylácie a oxidačnej fosforylácie. Syntézasacharidov počas fotosyntézy. Tri štádiá asimilácie  $\text{CO}_2$ . Základné reakcie a funkcia Calvinovho cyklu.

11. Metabolizmus lipidov. Mastné kyseliny ako zdroj metabolickej energie. Trávenie tukov – význam žlčových kyselín, enzýmov lipáz; chylomikrónov. Osud mastných kyselín vo svaloch a v tukovom tkanive. Uvoľnenie mastných kyselín z tukového tkaniva a ich prenos do tkanív (funkcia sérumalbumínu).  $\beta$ -oxidácia mastných kyselín – lokalizácia v bunke, prenos mastných kyselín do mitochondrií (funkcia karmitínu). Reakcie  $\beta$ -oxidácie – dehydrogenácia, hydratácia, dehydrogenácia, štiepenie, vznik acetyl-koenzýmu A. Osud acetyl-koenzýmu A – vstup do citrátového cyklu; vznik ketolátok, ich význam. Biosyntéza mastných kyselín – porovnanie s  $\beta$ -oxidáciou, východiskové zlúčeniny, reakcie kondenzácia, redukcia, dehydratácia, redukcia. Zdroje

NADPH. Transport triacylglycerolov a cholesterolu u ľudí, lipoproteíny.

12. Degradácia aminokyselín. Aminokyseliny ako zdroj metabolickej energie. Odbúranie aminokyselín – odstránenie aminoskupiny transamináciou a deamináciou (enzýmy transaminázy, glutamátdehydrogenáza). Význam glutamínu pri odbúraní AK (enzýmy glutamínsyntetáza, glutamináza). Formy vylučovania aminoskupiny u rôznych stavovcov. Močovinový cyklus – orgánová a bunková lokalizácia, význam. Osud uhlíkovej kostry aminokyselín, glukogénne, ketogénne aminokyseliny.

## Kapitola 3

## Kapitola 4

## Kapitola 5

## Kapitola 6

## Kapitola 7

## Kapitola 8



## Kapitola 9

## Kapitola 10