

# Bevezetés a bioinformatikába

Szabó-Zsidai Krisztina

[szabo-zsidai.krisztina@nik.uni-obuda.hu](mailto:szabo-zsidai.krisztina@nik.uni-obuda.hu)

Prof. Dr. Kozlovsky Miklós

[kozlovsky.miklos@nik.uni-obuda.hu](mailto:kozlovsky.miklos@nik.uni-obuda.hu)

2. előadás

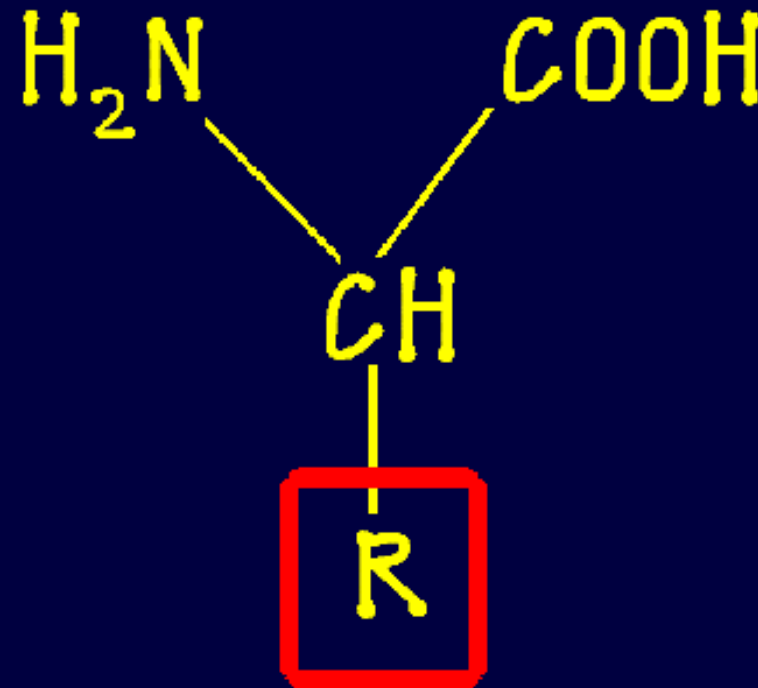
2022.09.19.

# Bevezetés

- Mi a kémia?
- Mi a biokémia?
- Mitől lesz valami élő anyag?
  - Fehérjék (aminosavak)
  - Nukleinsavak
  - Lipidek
  - Poliszacharidok

# I. Fehérjék

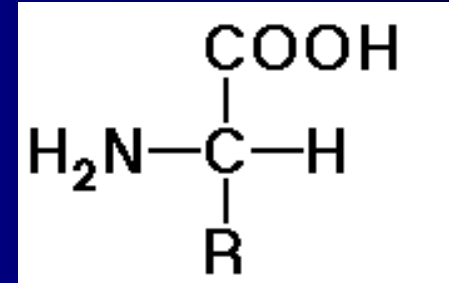
- Aminosav egységekből felépülő makromolekulák.
- Aminosavak:
  - COOH – karboxil-csoport
  - NH<sub>2</sub> – amino-csoport
  - Szénatom (alfa helyzetű)
  - R = valamilyen gyök
  - Általános képlet (képen):
  - (Prolin ettől kicsit eltér)



# Fehérjék szerepe az élőlényekben

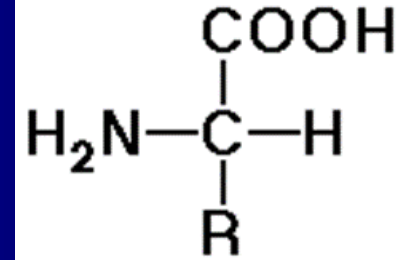
- Enzimek (katalitikus folyamatok)
- Transzportfehérjék (pl. sejthártyáknál)
- Védőfehérjék
- Toxinok
- Hormonok
- Struktúrafehérjék
- Tartalékfehérjék (pl. tojás, növények magvai)
- stb.

# Aminosavak 1.



- Szerkezetük az R-csoportban különbözik
- 20 természetes aminosavból építkezünk (fehérjeépítők)
  - Az esszenciális aminosavakat a táplálékkal veszünk magunkhoz
  - A többit képesek vagyunk szintetizálni
- Az oldalláncok kiemelkednek és ezek a biológiailag aktív csoportok

# Aminosavak 2.

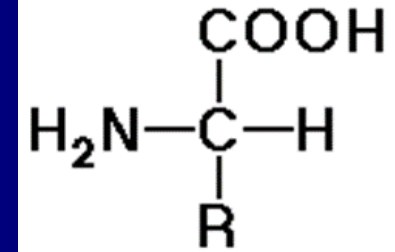


## Tudtad?

Az esszenciális aminosavak a fehérjék olyan alkotórészei, melyeket a szervezet egyáltalán nem, vagy csak részben képes szintetizálni. Ezeket az aminosavakat a táplálékkal, „kész” kell bevinni a hiányállapotok elkerülése végett.



# Aminosavak 3.



## Tudtad?

Limitáló aminosavnak nevezzük az olyan esszenciális aminosavakat, melyek az adott fehérje aminosav-összetételében a legkisebb arányban vannak jelen.

# Aminosavak az emberi szervezetben

<b>Esszenciális</b> (nélkülözhetetlen)	<b>Nem esszenciális</b> (előállítjuk)
Izoleucin – Ile	Alanin – Ala
Leucin – Leu	Aszparagin – Asn
Lizin – Lys	Aszpartánsav – Asp
Metionin – Met	Cisztein – Cys
Fenilalanin – Phe	Glutaminsav – Glutamát – Glu
Treonin – Thr	Glutamin – Gln
Triptofán – Trp	Glicin – Gly
Valin – Val	Prolin – Pro
Arginin* - Arg	Szerin – Ser
Hisztidin* - His	Tirosin – Tyr

Részben esszenciális: - Gyermekekben az előállítás nem megoldott  
- Arginin csak újszülötteknél lényeges



# Aminosavak csoportosítása

- Oldallánc szerint
- Sav-bázis tulajdonság szerint
- Vízoldhatóság szerint

# Oldallánc szerint 1.

- Glicin: nincs oldallánca
  - Gly glicin  $\text{H}_2\text{N}-\text{CH}_2-\text{COOH}$
- Egyszerű alkil (apoláris, szénhidrogén) oldallánc:
  - Ala alanin
  - Val valin
  - Leu leucin
  - Ile izoleucin
- Gyűrűs oldallánc (szekunder amin-csoport):
  - Pro prolin

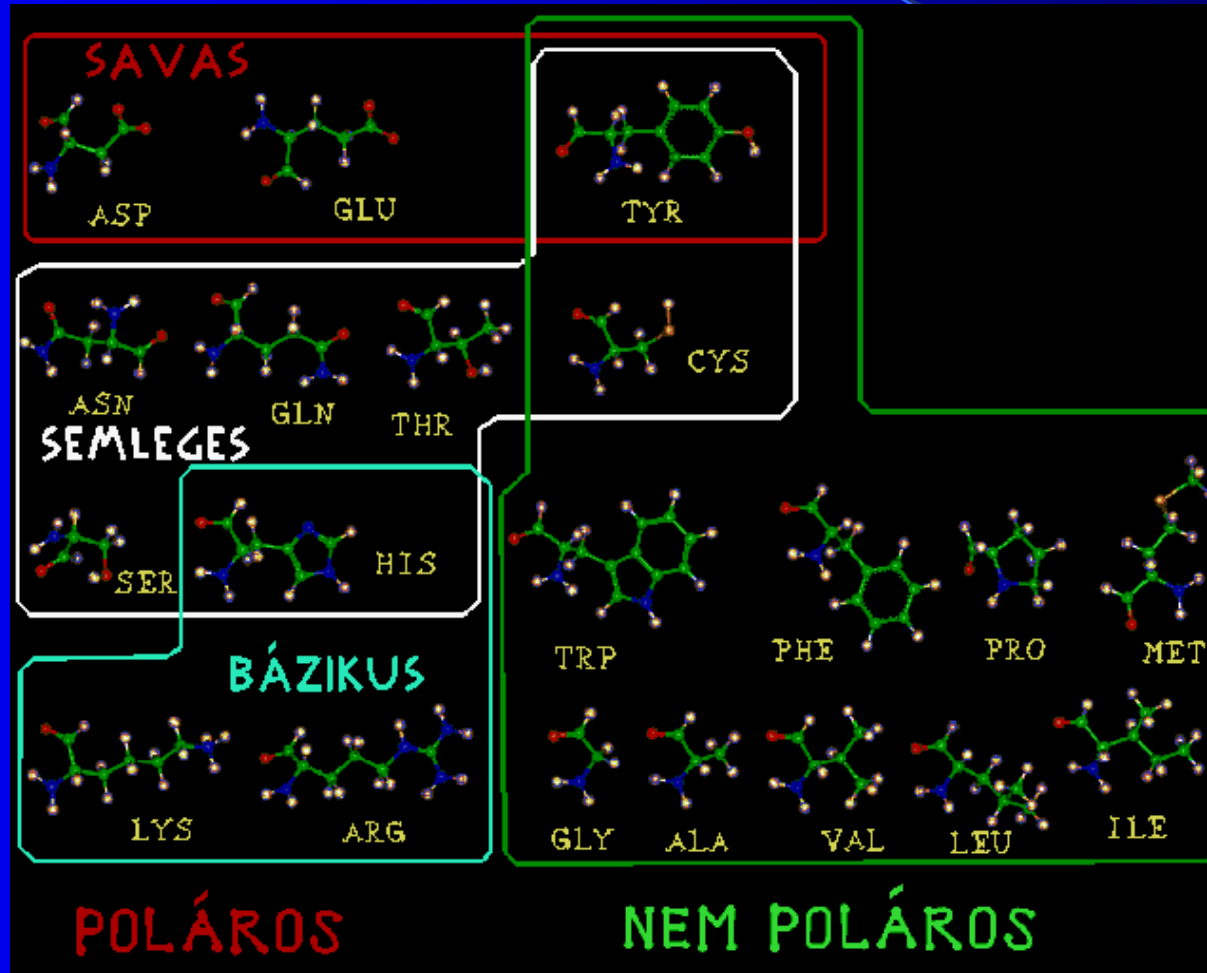
# Oldallánc szerint 2.

- Aromás oldallánc:
  - Phe fenil-alanin
  - Tyr tirozin
  - Trp triptofán
- Alkoholos oldallánc (-OH csoport):
  - Ser szerin
  - Thr treonin
- Kéntartalmú oldallánc (-SH csoport):
  - Cys cisztein  $\text{HS-CH}_2\text{-}$
  - Met metionin  $\text{H}_3\text{C-S-CH}_2\text{-CH}_2\text{-}$

# Oldallánc szerint 3.

- (Karbon)savas oldallánc (parciális negatív töltés):
  - Asp aszparaginsav  $\text{HOOC}-\text{CH}_2-$
  - Glu glutaminsav  $\text{HOOC}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-$
- Amid oldallánc (a fenti savakból):
  - Asn aszparagin  $\text{H}_2\text{NOC}-\text{CH}_2-$
  - Gln glutamin  $\text{H}_2\text{NOC}-\text{CH}_2-\text{CH}_2-$
- Bázikus oldallánc (parciális pozitív töltés):
  - Lys lizin  $\text{H}_2\text{N}-(\text{CH}_2)_4-$
  - Arg arginin
  - His hisztidin

# Aminosavak csoportosítása

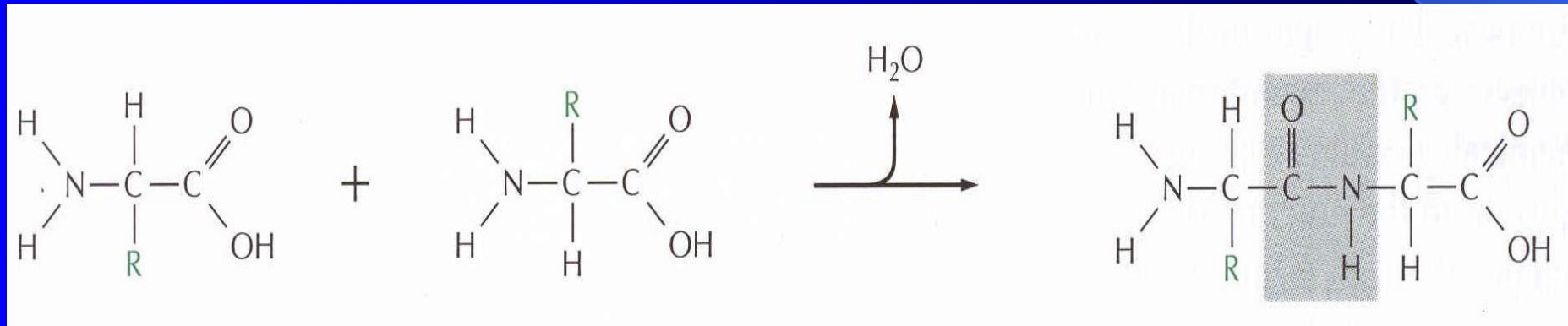


# Aminosavak kapcsolódása 1.

Az aminosavak egymáshoz **peptidkötéssel** kapcsolódnak.

Peptidek: molekulasúly < 10.000 (10-100 aminosav)

Proteinek: peptideknél nagyobbak, 100 aminosav felett



Dipeptid = két összekapcsolódott aminosav

Polipeptid = több összekapcsolódott aminosav 10-100



# Aminosavak kapcsolódása 2.

- **N-terminális** vég: A polipeptidlánc szabad amino-csoport ( $-\text{NH}_2$ ) felőli vége.
- **C-terminális** vég: A polipeptidlánc szabad karboxil-csoport ( $-\text{COOH}$ ) felőli vége.
- A peptidek elnevezését mindig az N-terminális aminosav felől kezdjük és a C-terminális aminosavval fejezzük be.

# Fehérjék

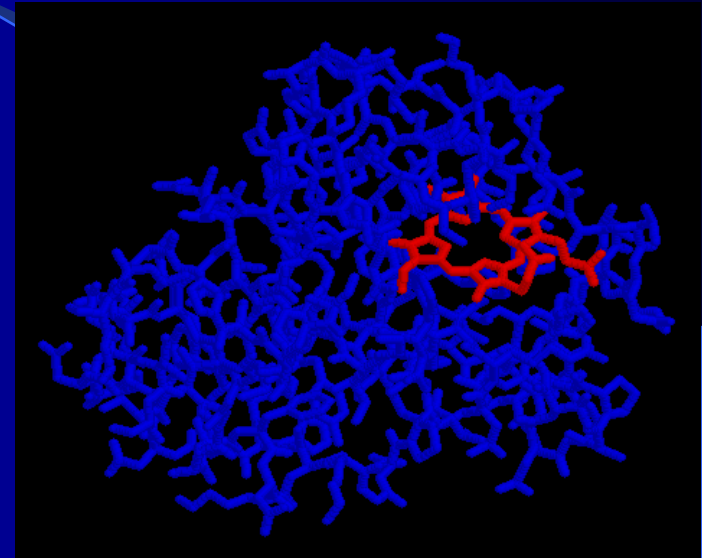
- **Proteinek:** Egyszerű fehérjék, csak aminosavakból épülnek fel.  
(pl.: albumin, miozin)
- **Proteidek:** Összetett fehérjék, aminosavakon kívül más, nem fehérje alkotórészt is tartalmaznak.  
(pl.: kromoproteidek – hemoglobin, glükoproteidek – mucin)

# Fehérjék alakja

A makromolekula alakja szerint:

- Globuláris (gömbszerű) fehérjék

- Gomolyagforma (pl.: mioglobin)



- Fibrilláris (fonalszerű) fehérjék (pl.: vázfehérjék)

- Nagy szilárdság, viszonylagos oldhatatlanság

- Pl.: tollak, szőrszálak, inak, stb.

# A fehérjék térszerkezetének szintjei

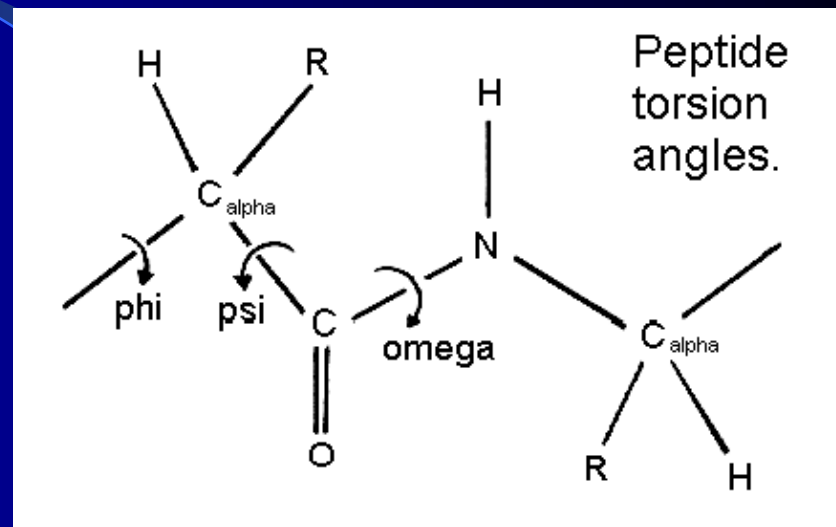
- Elsődleges szerkezet
- Másodlagos szerkezet
- Harmadlagos szerkezet
- Negyedleges szerkezet

# Elsődleges szerkezet

- A peptidláncot alkotó aminosavak minősége és sorrendje határozza meg.
- 100 aminosavból álló fehérje esetén  $20^{100}$  számú egymástól eltérő kombináció létezhetne!

# Másodlagos szerkezet

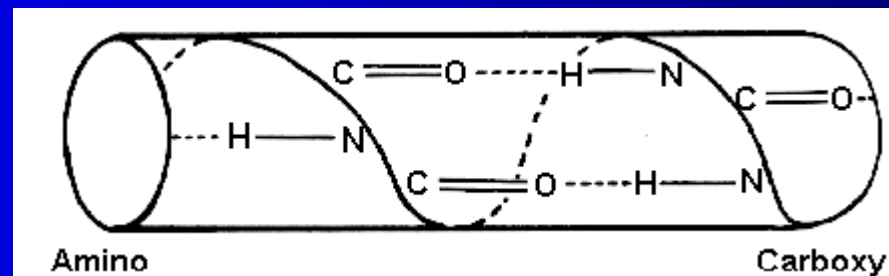
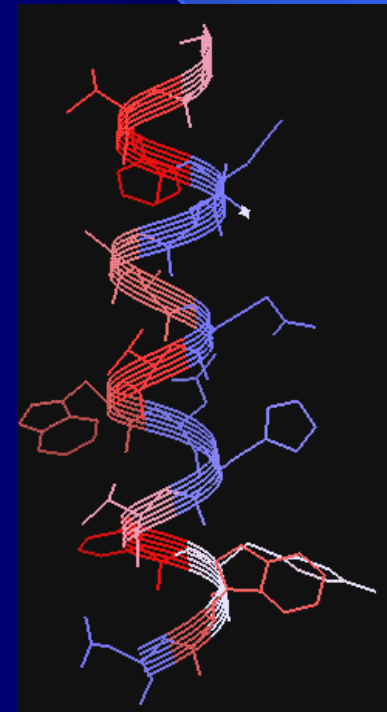
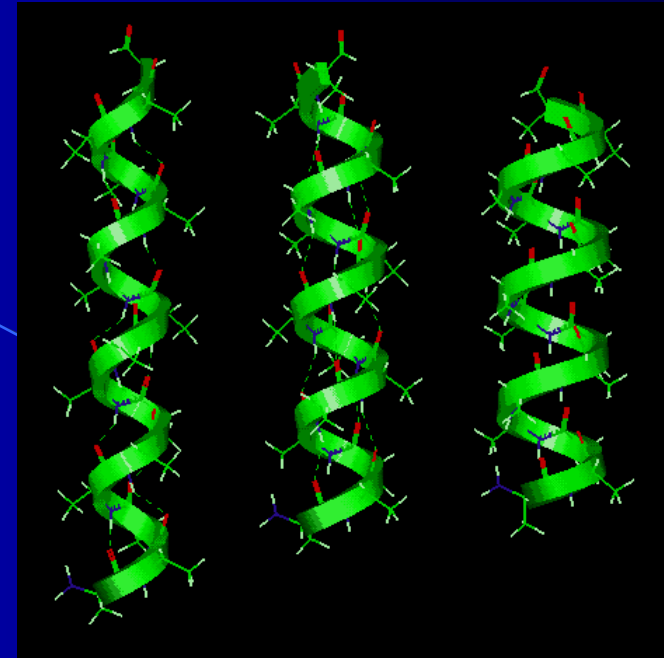
- A lánc gerincének rövid távú szerkezete.
- Szakaszokat különböztethetünk meg:
  - Periódikus szakasz (pl. hélix, ill béta-redő):
    - Homokonformációk: a (fi, pszi) pár ismétlődik.
  - Aperiódikus szakasz (pl. prolinban gazdag részek)
    - Heterokonformációk: a (fi, pszi) változik
  - Kanyarok (angolul: turn)
    - Béta kanyar
    - Gamma kanyar





# Hélixek

- $3_{10}$  hélix, Alfa-hélix, Pi-hélix
  - Az oldalláncok kifelé állnak.
  - Jobbkezes hélixek.
  - A balkezes energetikailag kedvezőtlen az oldalláncok ütközései miatt, ezért nem fordul elő.
- Amfipatikus alfa-hélix
  - A hélixnek a fehérje belseje felé eső oldalán elsősorban apoláros, a víz felé eső oldalán poláros oldalláncok vannak
- Egyéb
  - Poliprolin hélix, stb.



# Béta-redő

- Parallel vagy antiparallel módon futó szálak, közöttük H-kötések (mint a csúcsos háztetők).
- Az oldalláncok váltakozva lefelé és fölfelé állnak.
- A legtöbb béta-lemezben balkezes csavar van.

# Harmadlagos szerkezet

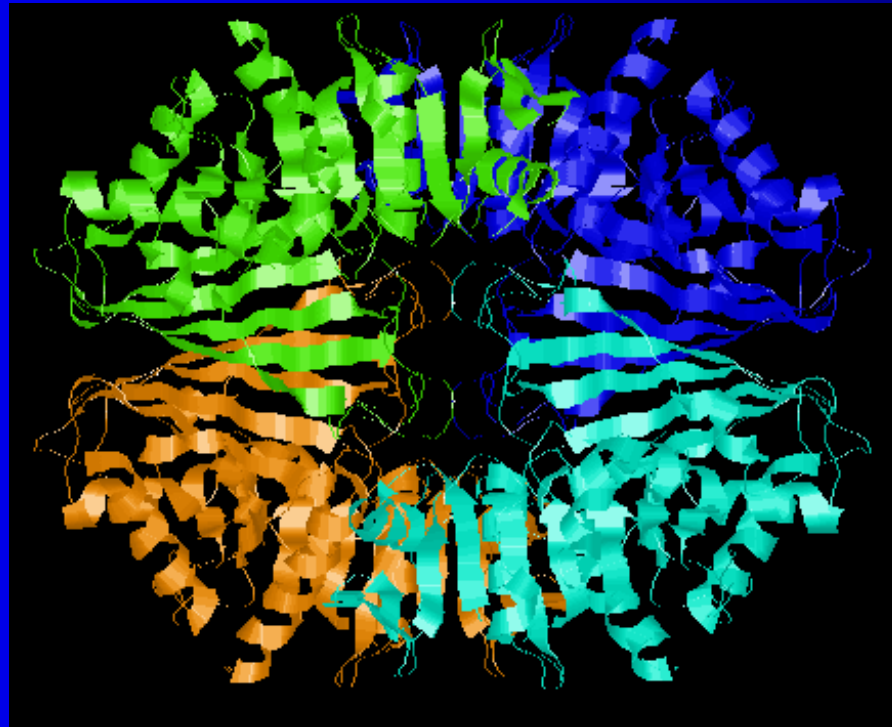
- A teljes polipeptidlánc térbeli szerkezete, a másodlagos szerkezeti elemek térbeli elrendeződése.
- A stabilitást jelentősen meghatározzák a feltekeredés miatt egymáshoz került oldalláncok között kialakuló kötések:
  - Diszulfidhidak
  - Ionkötések
  - Hidrogénkötések
  - Apoláris kötések



Az egymáshoz nagyjából hasonló térszerkezetű fehérjék általában egy szerkezeti családba tartoznak.

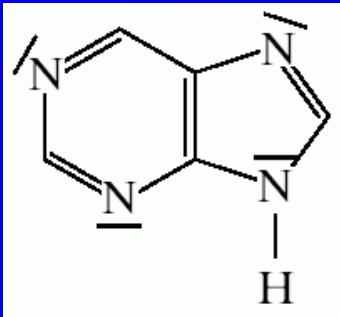
# Negyedleges szerkezet

Több polipeptidláncból álló fehérjék alegység szerkezete.

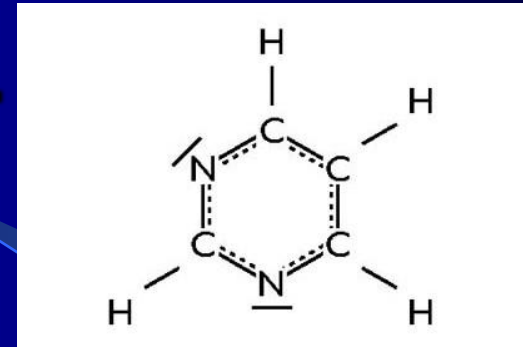


## II. Nukleinsavak 1.

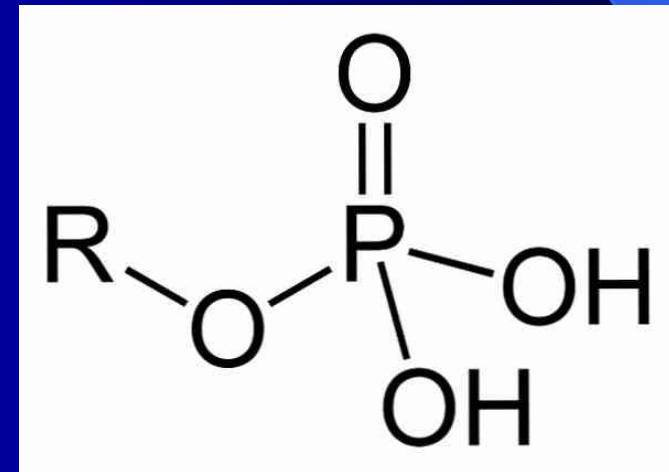
- Monomer nukleotid láncokból álló makromolekulák.
- Genetikai információt hordozó építőelemek.
- Pl: DNS, RNS



## Nukleinsavak 2.



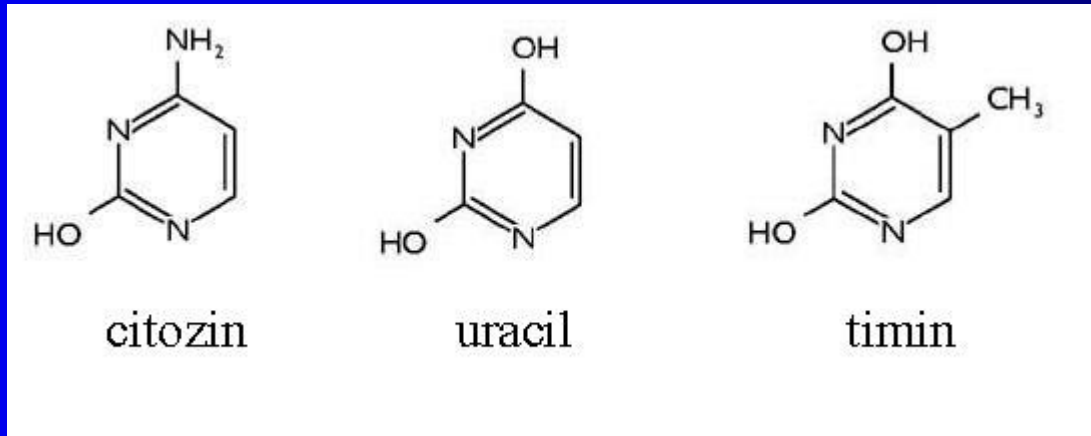
- Felépítésük:
- heterociklusos bázis (purin, pirimidin)
- pentóz (5-tagú cukorgyűrű)
- foszfátcsoport





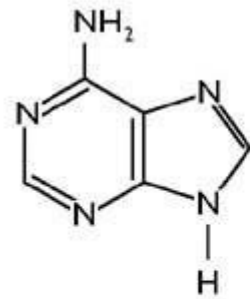
# Heterociklusos bázis 1.

- Pirimidin bázisok: citozin (DNS-ben és RNS-ben is), uracil (csak RNS), timin (csak DNS)

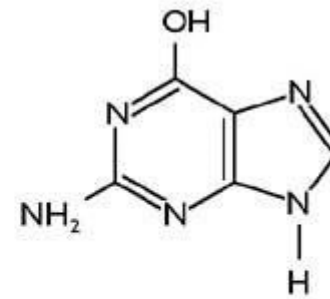


# Heterociklusos bázis 2.

- Purin bázisok: adenin, guanin (DNS-ben és RNS-ben is)



adenin

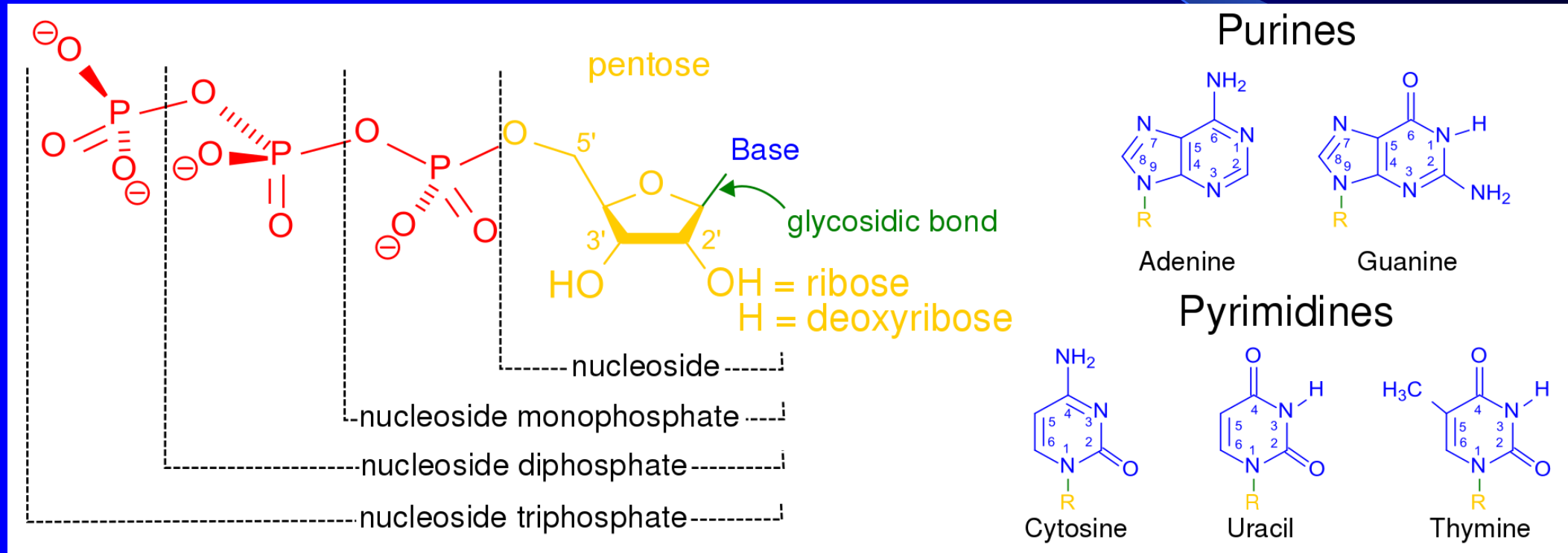


guanin

# Heterociklusos bázisok 3.

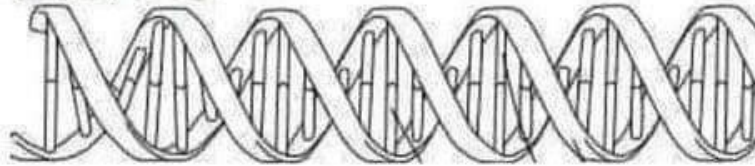
A logo featuring the letters 'ATGC' in a bold, black, serif font. A black DNA double helix is positioned between the 'T' and 'G'.

# Nukleinsavak 3.

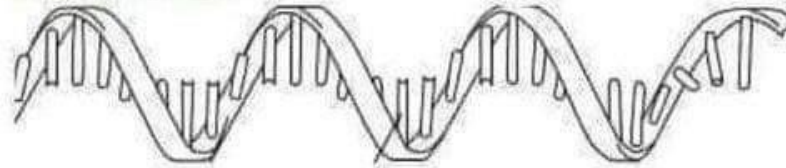


# Nukleinsavak 4.

DNS



RNS



1NS

---

# Kromoszómák

- Hosszú DNS molekulák, amelyekben sok gén található.



Chromosomes as captured via  
electron micrograph.



# III. Lipidek

- Glicerint és zsírsavat tartalmazó apoláris makromolekulák.
- Hidrolizálható lipidek:
  - Neutrális zsírok
  - Foszfátidok
- Nem hidrolizálható lipidek:
  - Szteroidok
  - Karotinoidok

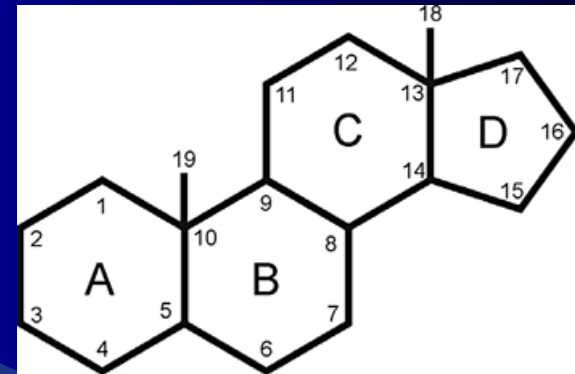
# Neutrális zsírok

- Felépítésük: háromértékű alkohol (glicerín) + 3 zsírsav
- 
- Tulajdonságuk: apoláris molekulák
- „Hasznuk”: vitamin oldószer, hő és mechanikai védelem
- Pl: sertészsír, cetzsír, tőkeolaj, repceolaj

# Foszfatidok

- Felépítésük: glicerín + 2 zsírsav +  $\text{H}_3\text{PO}_4$  + poláris molekula észtere
- Tulajdonságuk: poláris és apoláris (amfipatikus)
- „Hasznuk”: micellákat (belül hidrofób rész, kívül pedig hidrofíl rész) és membránokat (határhártyákat) képeznek
- Pl: lecitin, kefalin

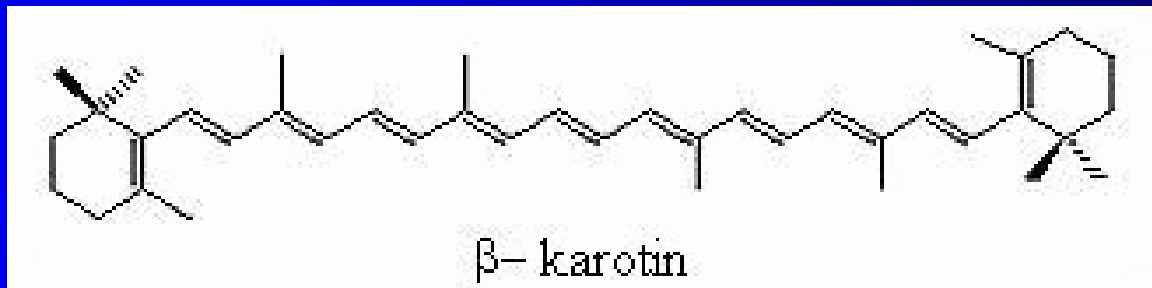
# Szteroidok



- Felépítésük: szteránváz (gonán alapváz) + oldalláncok
- 
- Tulajdonságuk: apolárisak
- „Hasznuk”: hormonok, epesav, felületi feszültség csökkentők
- Pl: ösztrogén, tesztoszteron, koleszterin, D-vitamin

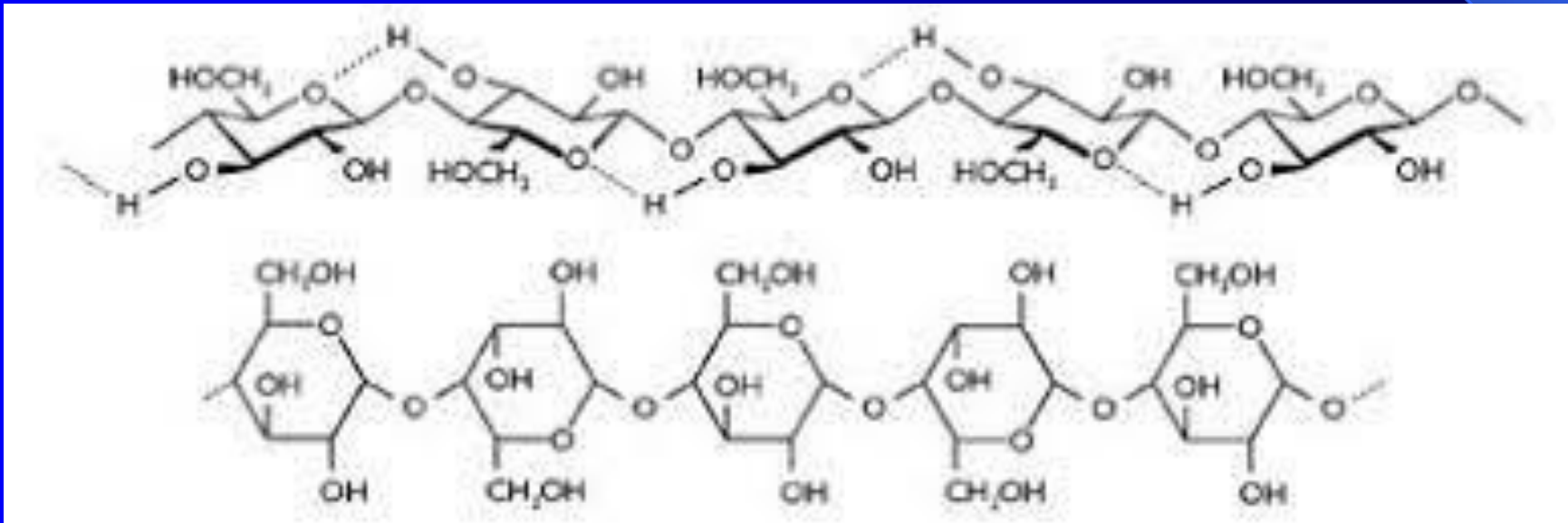
# Karotinoidok

- Felépítésük: izoprén származékok
- Tulajdonságuk: apoláris, konjugált kötések jellemzik a szénláncot, ami miatt ezek a lipidek színanyagok
- „Hasznuk”: fotoszintetikus festékek, színanyagok
- Pl: karotin, likopil, xantofill, A-vitamin



# IV. Poliszacharidok

- Nagyszámú monoszacharid egység összekapcsolódása glikozidos kötéssel,  $H_2O$  molekula kilépése közben.



# Tulajdonságaik

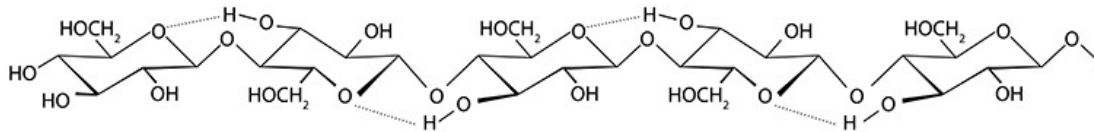
- Nem oldódnak vízben: polárisak.
- Nem redukáló hatásúak (nem redukálószeresek).
- Nem édes ízűek.
- Semmi cukorszerű nincs bennük.
- Állati és növényi sejtek építőkövei.



# Csoportosításuk

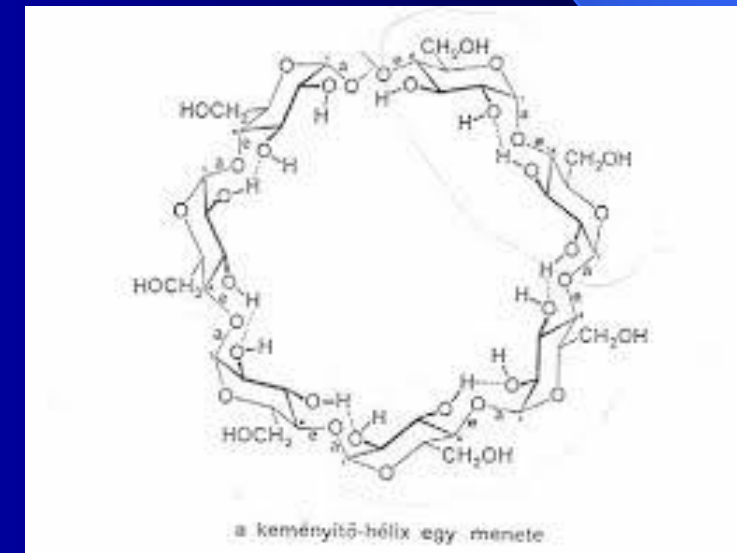


- Az élő szervezetben betöltött funkciójuk szerint csoportosítják:  
Vázanyagok (cellulóz, xilán, mannán, pektin, kitin)



A cellulózlánc részlete

- Tartalék tápanyagok (keményítő, glikogén)



a keményítő-hélix egy menete





● Köszönöm a figyelmet!