

Η βάση δεδομένων PDB(Protein Data Bank) είναι μία τεράστια βάση δεδομένων στην οποία αποθηκεύονται τα δεδομένα για κάθε βιομόριο του οποίου εξακριβώνεται η σύνθεση αλλά και η δομή.

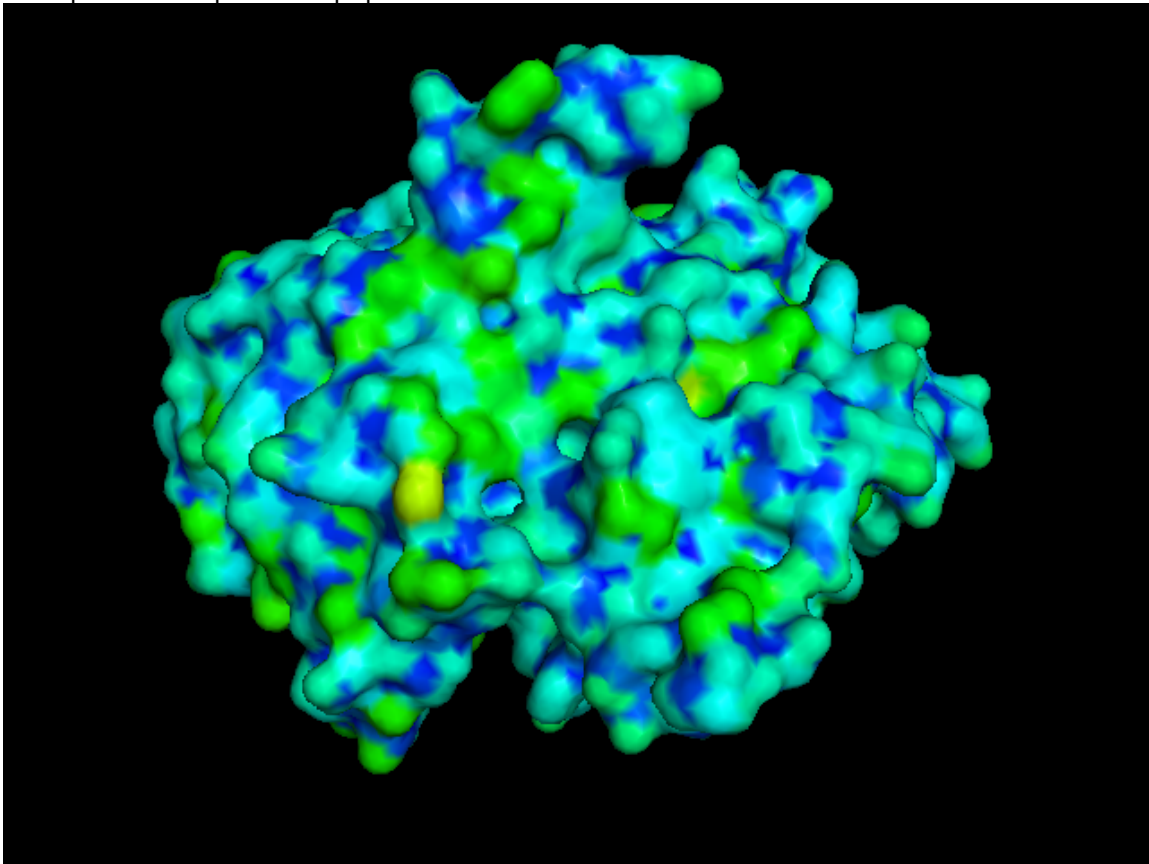
Προς επεξεργασία επιλέχθηκε ένα ένζυμο, πιο συγκεκριμένα μία τρανσφεράση, με αριθμό καταχώρισης στην PDB, 3SPX.

<http://www.rcsb.org/pdb/explore/explore.do?structureId=3spx>

<http://en.wikipedia.org/wiki/Enzyme>

<http://en.wikipedia.org/wiki/Transferase>

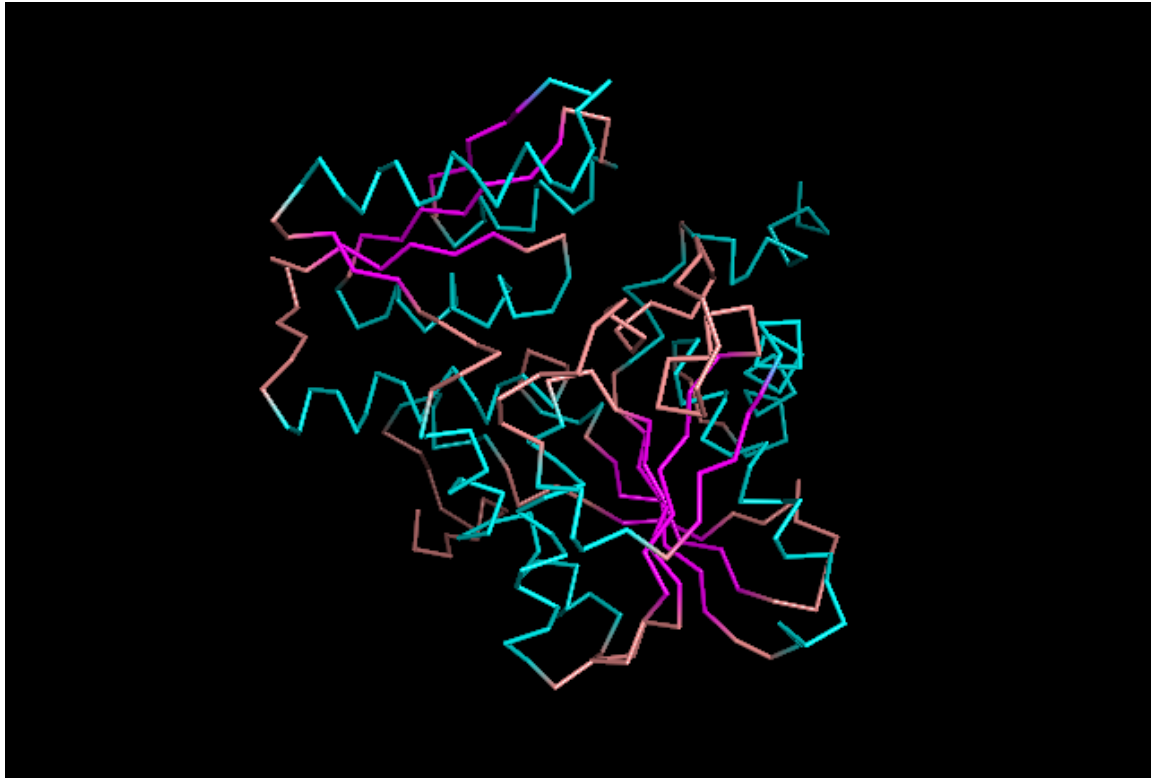
Μία τρισδιάστατη απεικόνιση:



Οι πρωτεΐνες είναι προϊόντα του μεταβολισμού των οργανισμών. Σχηματίζονται από την "ανάγνωση" του DNA μέσω της διαδικασίας της μετάφρασης και διαμορφώνονται μέσω της δράσης ενζύμων.

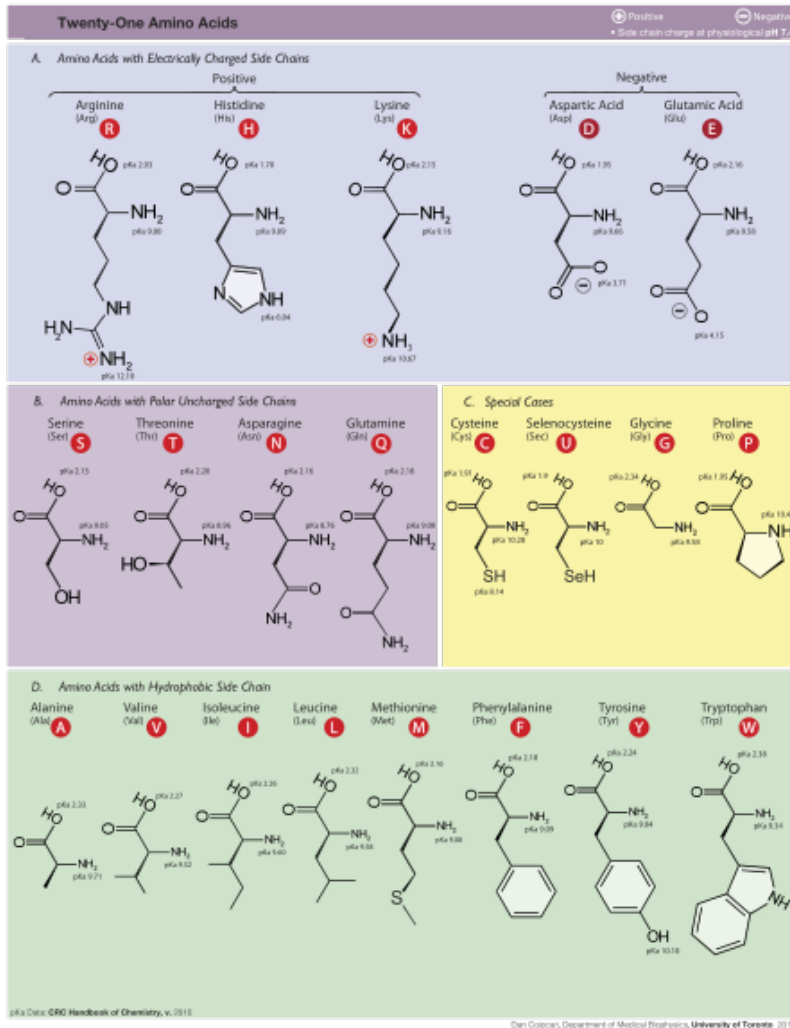
Η περίπλοκη μορφή τους μπορεί να κατανοηθεί, μόνο μέσω της ανάλυσης των επιμέρους συστατικών.

Κατα αρχήν πρόκειται για μία αλυσίδα, με αρχή και τέλος:



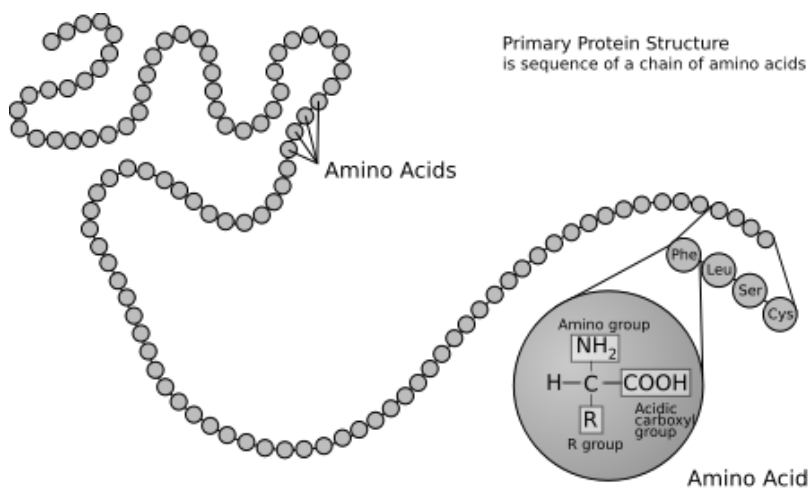
Πρόκειται για μία αλληλουχία ατόμων, πιο συγκεκριμένα ατόμων άνθρακα, υδρογόνου, αζώτου και οξυγόνου. Τα οποία συνδυαζόμενα συνθέτουν τα αμινοξέα.

Τα αμινοξέα αποτελούν τα βασικά δομικά συστατικά των πρωτεϊνών. Υπάρχουν 21 αμινοξέα, τα οποία συνδυαζόμενα σε πολυπεπτιδικές αλυσίδες συνθέτουν αυτήν την τεράστια ποικιλία βιομορίων.



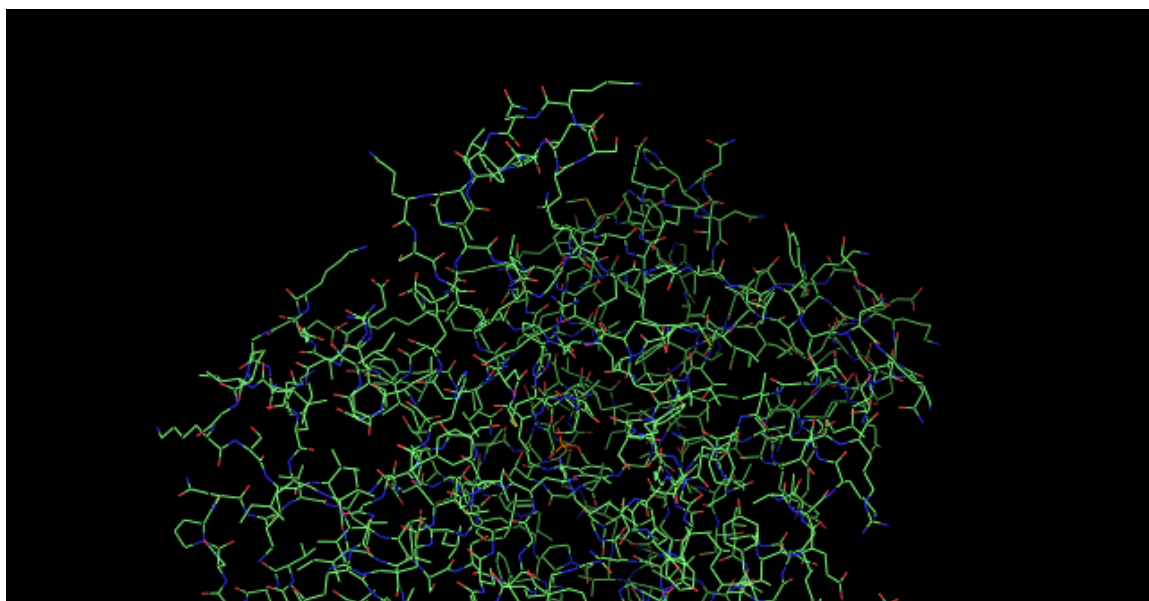
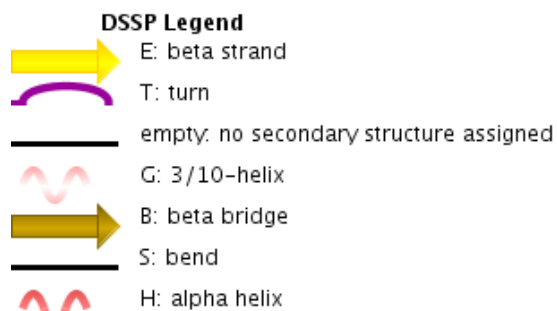
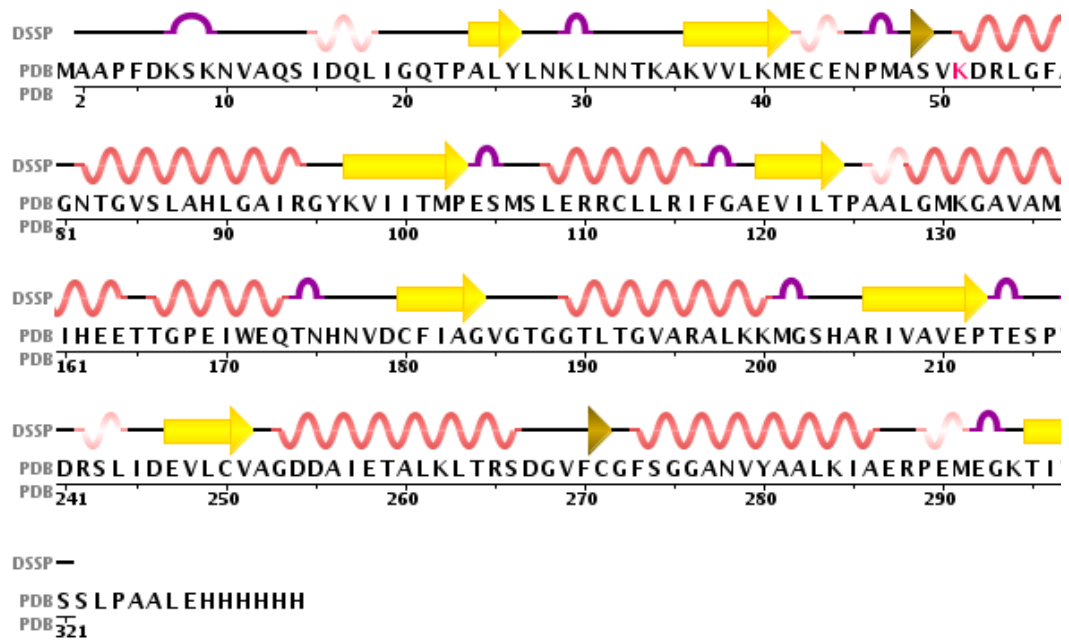
http://en.wikipedia.org/wiki/Amino_acid

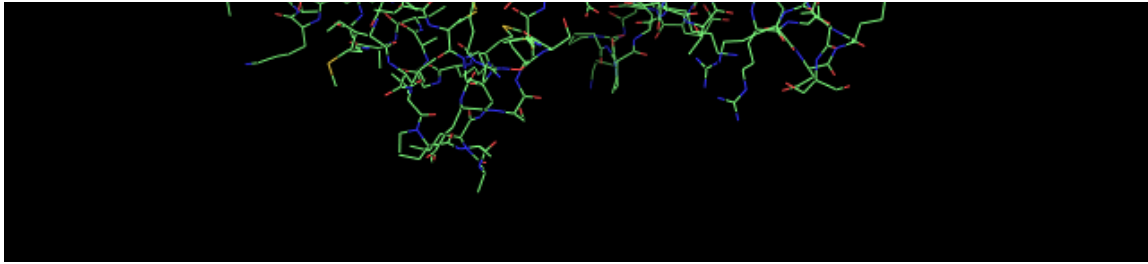
Η ακολουθία των αμινοξέων καθορίζει την πρωτοταγή δομή της πρωτεΐνης.



http://en.wikipedia.org/wiki/Protein_primary_structure#Primary_structure_of_polypeptides

Αυτή είναι η ακολουθία αμινοξέων του βιομορίου που επεξεργαζόμαστε:

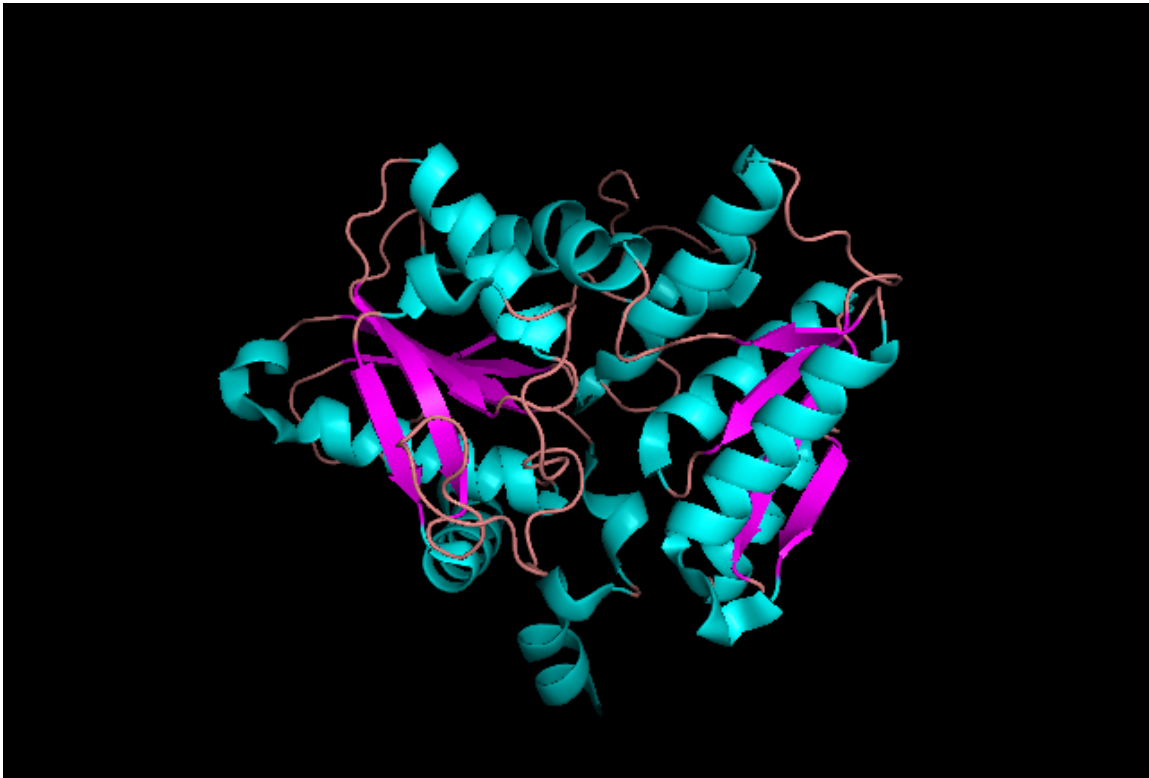




Τα αμινοξέα κατόπιν σχηματίζουν διακριτές αλυσίδες οι οποίες μπορεί να έχουν διάταξη σπείρας, ευθεία ή ακανόνιστη.

Αυτές οι επιμέρους αλυσίδες καθορίζουν τη δευτεροταγή δομή της αλυσίδας μας

http://en.wikipedia.org/wiki/Protein_secondary_structure



Η τριτοταγής δομή καθορίζεται από τον τρόπο με τον οποίο οι επιμέρους αλυσίδες αναδιπλώνονται, σχηματίζοντας την τρισδιάστατη διάταξη του βιομορίου

http://en.wikipedia.org/wiki/Protein_tertiary_structure