

Νικολέττα Πιπερίδου ΑΕΜ 8366 (1ΕΜΑ)

```
>sp|P42212|GFP_AEQVI Green fluorescent protein OS=Aequorea victoria
GN=GFP PE=1 SV=1
MSKGEELFTGVVPIILVELDGDVNGHKFSVSGEGEGDATYGKLTLLKFICTTGKLPVPWPTL
VTTFSYGVQCFSRYPDHMKQHDFFKSAMPEGYVQERTIFFKDDGNYKTRAEVKFEGLTLV
NRIELKGIDFKEDGNILGHKLEYNYNSHNVYIMADKQKNGIKVNFKIRHNIEDGSVQLAD
HYQQNTPIGDGPVLLPDNHYLSTQSALS KDPNEKRDHMLLEFVTAAGITHGMDELYK
```

Πρωτοταγής δομή (αμινοξική ακολουθία) της 1ΕΜΑ:

```
      10      20      30      40      50      60
MSKGEELFTG VVPILVELDG DVNGHKFSVS GEGEGDATYG KLTLLKFICTT GKLPVPWPTL

      70      80      90     100     110     120
VTTFSYGVQC FSRYPDHMKQ HDFFKSAMPE GYVQERTIFF KDDGNYKTRA EVKFEGLTLV

     130     140     150     160     170     180
NRIELKGIDF KEDGNILGHK LEYNYNSHNV YIMADKQKNG IKVNFKIRHN IEDGSVQLAD

     190     200     210     220     230
HYQQNTPIGD GPVLLPDNHY LSTQSALS KDPNEKRDHML LEFVTAAGIT HGMDELYK
```

Οι φυσικοχημικές παράμετροι της πρωτεΐνης όπως βρέθηκαν από το ProtParam:

Number of amino acids: 238

Molecular weight: 26886.3

Theoretical pI: 5.67

Amino acid composition:

CSV format

Ala (A)	8	3.4%
Arg (R)	6	2.5%
Asn (N)	13	5.5%
Asp (D)	18	7.6%
Cys (C)	2	0.8%
Gln (Q)	8	3.4%
Glu (E)	16	6.7%
Gly (G)	22	9.2%
His (H)	10	4.2%
Ile (I)	12	5.0%
Leu (L)	19	8.0%
Lys (K)	20	8.4%
Met (M)	6	2.5%
Phe (F)	13	5.5%
Pro (P)	10	4.2%
Ser (S)	11	4.6%
Thr (T)	15	6.3%
Trp (W)	1	0.4%
Tyr (Y)	11	4.6%
Val (V)	17	7.1%
Pyl (O)	0	0.0%
Sec (U)	0	0.0%
(B)	0	0.0%
(Z)	0	0.0%

(X) 0 0.0%

Total number of negatively charged residues (Asp + Glu): 34

Total number of positively charged residues (Arg + Lys): 26

Atomic composition:

Carbon	C	1205
Hydrogen	H	1848
Nitrogen	N	318
Oxygen	O	365
Sulfur	S	8

Formula: $C_{1205}H_{1848}N_{318}O_{365}S_8$

Total number of atoms: 3744

Extinction coefficients:

Extinction coefficients are in units of $M^{-1} cm^{-1}$, at 280 nm measured in water.

Ext. coefficient 22015
Abs 0.1% (=1 g/l) 0.819, assuming all pairs of Cys residues form cystines

Ext. coefficient 21890
Abs 0.1% (=1 g/l) 0.814, assuming all Cys residues are reduced

Estimated half-life:

The N-terminal of the sequence considered is M (Met).

The estimated half-life is: 30 hours (mammalian reticulocytes, in vitro).

>20 hours (yeast, in vivo).

>10 hours (Escherichia coli, in vivo).

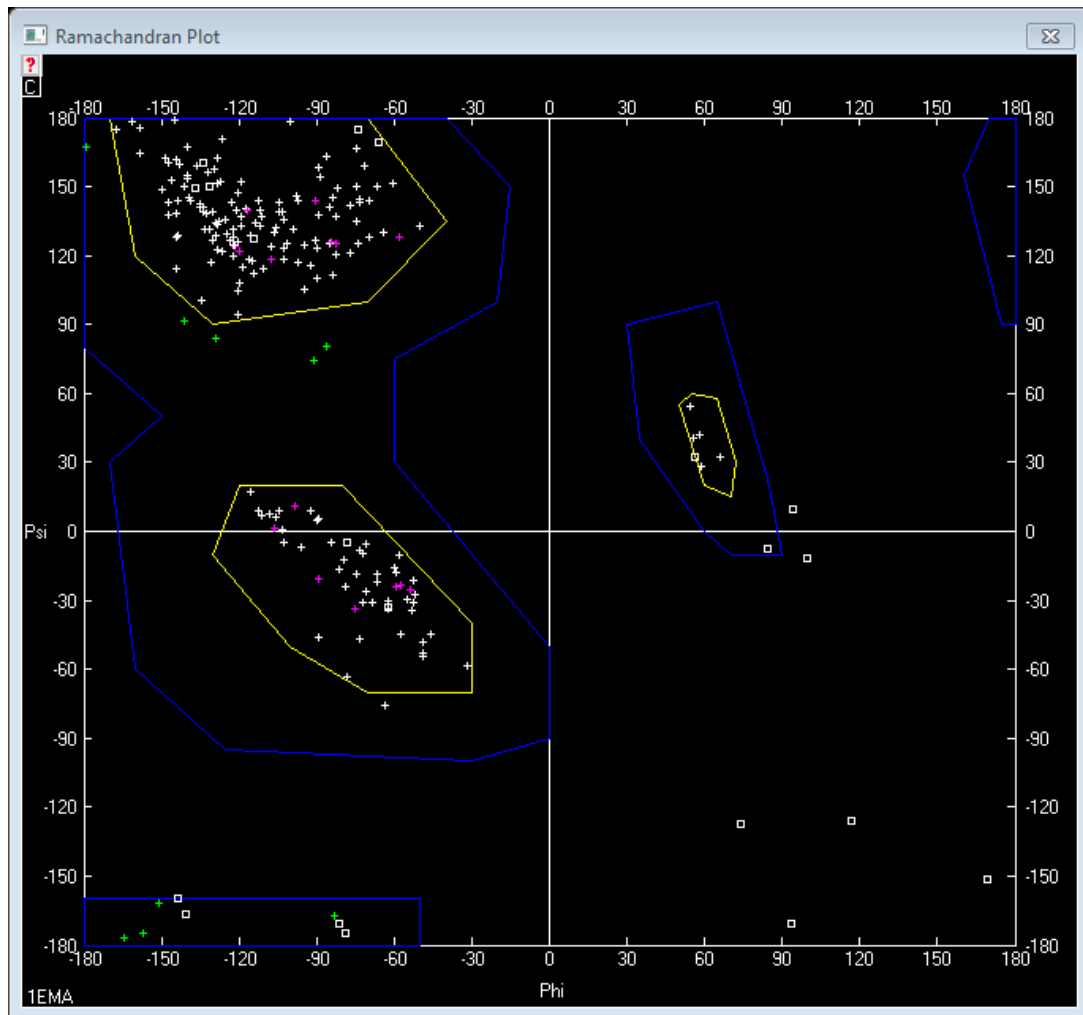
Instability index:

The instability index (II) is computed to be 31.07

This classifies the protein as stable.

Aliphatic index: 74.87

Grand average of hydropathicity (GRAVY): -0.521



Ramachandran plot για την πρωτεΐνη 1EMA

Σύμφωνα με το διάγραμμα Ramachandran τα αμινοξέα που βρίσκονται έξω από τις κίτρινες περιοχές είναι:

- Phe 165
- Asp 36
- Asp 155
- Asp 82
- Tyr 143
- Asp 103
- Ala 227
- His 199
- Ser 175

Ερμηνεία διαγράμματος

Τα τετραγωνάκια αντιπροσωπεύουν μόρια γλυκίνης τα οποία έχουν μεγαλύτερο εύρος επιτρεπόμενων διαμορφώσεων, λόγω έλλειψης πλευρικής αλυσίδας στο μόριο τους (μειωμένη στεreoχημική παρεμπόδιση).

Στις περιοχές εσωτερικά των κίτρινων σχεδίων βρίσκονται τα αμινοξέα που συμμετέχουν με επιτρεπτές γωνιακές διαμορφώσεις στις α -έλικες και στα β -ελάσματα. Οι περιοχές που περιβάλλονται από το μπλέ σχέδιο και είναι έξω από τα κίτρινα (πάνω-αριστερά) είναι επιτρεπόμενες για ελαφρώς μεγαλύτερες προσεγγίσεις των αμινοξέων μεταξύ τους από το ιδανικό. Ως αποτέλεσμα αυτής της μεγαλύτερης επιτρεπτότητας στις διευθετήσεις των αμινοξέων προκύπτει η κίτρινη περιοχή πάνω-δεξιά στην οποία βρίσκονται αμινοξέα που μπορούν να συμμετέχουν σε διαμόρφωση αριστερόστροφης έλικας.

Στο διάγραμμα Ramachandran για την 1EMA τα αμινοξέα που μπορούν να συμμετέχουν σε διαμόρφωση αριστερόστροφης έλικας είναι 2 ασπαραγγίνες, 2 ασπαραγγινικά οξέα, μια ιστιδίνη και μια γλυκίνη και αυτό γιατί μπορούν να προσφέρουν σταθερότητα μέσω δεσμών υδρογόνου.

Ανάμεσα στα αμινοξέα που βρίσκονται εκτός των επιτρεπόμενων περιοχών, όπως αναφέρθηκαν παραπάνω είναι 4 μόρια ασπαραγγινικού οξέος, 1 ιστιδίνη και 1 σερίνη (μικρά και πολικά κατάλοιπα αμινοξέων), 1 φαινυλαλανίνη (ογκώδες υδρόφοβο μόριο), 1 μόριο αλανίνης και 1 τυροσίνη (πολικό και ογκώδες μόριο).