

ΔΟΜΙΚΗ ΒΙΟΧΗΜΕΙΑ ΚΑΙ ΣΤΟΙΧΕΙΑ ΒΙΟΠΛΗΡΟΦΟΡΙΚΗΣ
ΕΡΓΑΣΙΑ ΑΝΑΛΥΣΗΣ ΔΟΜΗΣ ΠΡΩΤΕΙΝΩΝ
ΜΑΡΤΙΟΣ 2014

ΟΝΟΜΑΤΕΠΩΝΥΜΟ:	AAA AAA	ΑΕΜ:	1111
ΚΩΔΙΚΟΣ ΠΡΩΤΕΙΝΗΣ:		2HHB	

A. Στοιχεία μελέτης

Τίτλος	The crystal structure of human deoxyhaemoglobin at 1.74 Å resolution.
Συγγραφείς	Fermi, G., Perutz, M.F., Shaanan, B., Fourme, R.
Περιοδικό	(1984) J.Mol.Biol. 175: 159-174
Μέθοδος εύρεσης δομής	X-RAY DIFFRACTION
Περίληψη	<p>Η δομή της ανθρώπινης διοξυαιμοσφαιρίνης προσδιορίστηκε με ανάλυση 1.74Å χρησιμοποιώντας δεδομένα που συλλέχθηκαν σε φιλμ σε θερμοκρασία δωματίου από μια πηγή ακτίνων X σύγχροτου. Ο κρυσταλλογραφικός παράγοντας R είναι 16,0 %. Το εκτιμώμενο σφάλμα των ατομικών θέσεων είναι 0,1 Å γενικά, 0,14 Å για τα άτομα των εσωτερικών τμημάτων της κύριας αλυσίδας και 0,05 Å για τα άτομα του σιδήρου.</p> <p>Μελετήθηκαν τα αποτελέσματα των διαμοριακών αλληλεπιδράσεων στη δομή. Οι αλληλεπιδράσεις αυτές προκαλούν μόνο εξαιρετικά τοπικές στρεβλώσεις, όπως προκύπτει από το βαθμό της μοριακής ασυμμετρίας που προκαλούν. Η γεωμετρία του συμπλόκου σιδήρου - αζώτου μοιάζει πολύ με εκείνη της δομής της δεοξυαιμοσφαιρίνης του Takano (1977) και πεντασυναρμοσμένων μοριακών μοντέλων των Hoard (1975) και Jameson (1980).</p> <p>Η απόσταση του σιδήρου από το μέσο επίπεδο των αζώτων της πορφυρίνης της α- και της β-αίμης είναι 0.40(5) Å και 0.36 (5) Å, αντίστοιχως, σε αντίθεση με την αντίστοιχη απόσταση των 0.12(8) Å και -0.11(8) Å στην οξυαιμοσφαιρίνη (Shaanan, 1983). Το μήκος δεσμού Fe-N είναι 2.12(4) Å και το μήκος του δεσμού Fe-N (πορφυρίνης είναι 2.06(2) Å. Το μήκος αυτό είναι επίσης σε καλή συμφωνία με μετρήσεις φασματοσκοπίας φθορισμού εκτεταμένων ακτίνων X για την διοξυαιμοσφαιρίνη (Eisenberger, 1978, Perutz, 1982).</p> <p>Τα μόρια της αίμης είναι θολωτά προς το πλησιέστερο αμινοξύ. Η απόσταση μεταξύ των μέσων επιπέδων των ατόμων N (πορφυρίνης) και των ατόμων C (πορφυρίνης) είναι 0.16(6) Å και 0.10(6) Å, αντίστοιχως στην α- και β-αίμη. Στα μόρια της α-αίμης, οι κάθετοι στα μέσα των πυρρολικών δακτυλίων κλίνουν ομοιόμορφα προς το κέντρο αίμης, κατά περίπου τρεις μοίρες ως προς την κάθετο στο κέντρο αίμης, και υπάρχει μια αναδίπλωση περίπου τεσσάρων μοιρών της αίμης γύρω από έναν άξονα που ορίζεται από τους άνθρακες μεταξύ των πυρρολικών δακτυλίων και τις πλευρικές αλυσίδες. Στα μόρια της β-αίμης, δεν υπάρχει τέτοια αναδίπλωση, και μόνο οι πυρρολικοί δακτύλιοι II και IV (αυτά που καλύπτονται από την F8 His) είναι αισθητά κεκλιμένοι κατά περίπου οκτώ μοίρες. Η ανεξαρτησία αυτών των παραμέτρων από περιορισμούς που επιβάλλονται στο μοντέλο επαληθεύθηκε με ανεξέλεγκτη βελτιστοποίηση ολόκληρου του μορίου αρχίζοντας από μια δομή με τροποποιημένη τη γεωμετρία της αίμης.</p>

B. Αλυσίδες και άλλα μόρια

Πλήθος αλυσίδων	4
Πλήθος μοναδικών αλυσίδων	2
Συμβολισμός	Αλυσίδα A Αλυσίδα B
Κατάλοιπα ανά αλυσίδα	Αλυσίδα A: 141 Αλυσίδα B:146
Άλλα μόρια ανά αλυσίδα	Αλυσίδα A: Αίμη Αλυσίδα B: Αίμη, PO ₄ ³⁻
Μόρια νερού	52

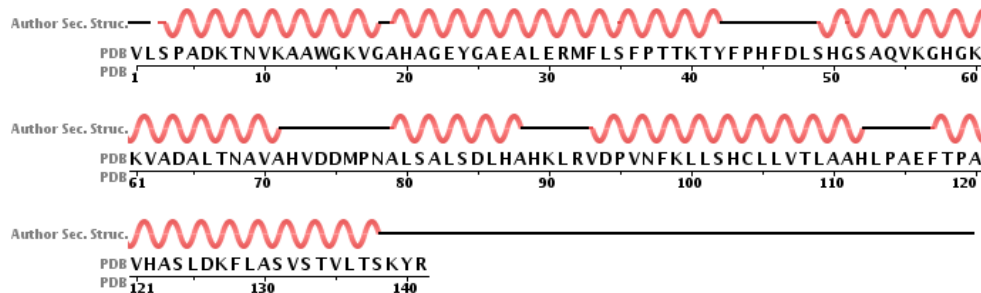
Κατάλοιπα ανά αλυσίδα από το αρχείο *.pdb και γραφικά από PDB	<p>Αλυσίδα A</p> <p>PDB VLS PADKTNVKAAWGKVGAHAGEYGAELERMFLSFPPTTKTYFPHFDLSHGSAQVKGHGK PDB 1 10 20 30 40 50 60</p> <p>PDB KVADALTNAVAVHDDMPNALSALSIDLHAHKLRVDPVNFKLLSHCLLVTLAAHLPAEFTPA PDB 61 70 80 90 100 110 120</p> <p>PDB VHASLDKFLASVSTVLT SKYR PDB 121 130 140</p> <p>SEQRES 1 A 141 VAL LEU SER PRO ALA ASP LYS THR ASN VAL LYS ALA ALA SEQRES 2 A 141 TRP GLY LYS VAL GLY ALA HIS ALA GLY GLU TYR GLY ALA SEQRES 3 A 141 GLU ALA LEU GLU ARG MET PHE LEU SER PHE PRO THR THR SEQRES 4 A 141 LYS THR TYR PHE PRO HIS PHE ASP LEU SER HIS GLY SER SEQRES 5 A 141 ALA GLN VAL LYS GLY HIS GLY LYS LYS VAL ALA ASP ALA SEQRES 6 A 141 LEU THR ASN ALA VAL ALA HIS VAL ASP ASP MET PRO ASN SEQRES 7 A 141 ALA LEU SER ALA LEU SER ASP LEU HIS ALA HIS LYS LEU SEQRES 8 A 141 ARG VAL ASP PRO VAL ASN PHE LYS LEU LEU SER HIS CYS SEQRES 9 A 141 LEU LEU VAL THR LEU ALA ALA HIS LEU PRO ALA GLU PHE SEQRES 10 A 141 THR PRO ALA VAL HIS ALA SER LEU ASP LYS PHE LEU ALA SEQRES 11 A 141 SER VAL SER THR VAL LEU THR SER LYS TYR ARG</p> <p>Αλυσίδα B</p> <p>PDB VHLTPEEKSAVTALWGKVNVDVEVGGELGRLLVVYPWTQRFFESFGDLS TPDVAVMGNPKV PDB 1 10 20 30 40 50 60</p> <p>PDB KAHGKKVLGAFSDGLAHL DNLKGT FATLS ELHCDK LHVDPENFRLLGNVLVCVLAHHFGK PDB 61 70 80 90 100 110 120</p> <p>PDB EFTPPVQAAYQKVVAGVANALAHKYH PDB 121 130 140 146</p> <p>SEQRES 1 B 146 VAL HIS LEU THR PRO GLU GLU LYS SER ALA VAL THR ALA SEQRES 2 B 146 LEU TRP GLY LYS VAL ASN VAL ASP GLU VAL GLY GLY GLU SEQRES 3 B 146 ALA LEU GLY ARG LEU LEU VAL VAL TYR PRO TRP THR GLN SEQRES 4 B 146 ARG PHE PHE GLU SER PHE GLY ASP LEU SER THR PRO ASP SEQRES 5 B 146 ALA VAL MET GLY ASN PRO LYS VAL LYS ALA HIS GLY LYS SEQRES 6 B 146 LYS VAL LEU GLY ALA PHE SER ASP GLY LEU ALA HIS LEU SEQRES 7 B 146 ASP ASN LEU LYS GLY THR PHE ALA THR LEU SER GLU LEU SEQRES 8 B 146 HIS CYS ASP LYS LEU HIS VAL ASP PRO GLU ASN PHE ARG SEQRES 9 B 146 LEU LEU GLY ASN VAL LEU VAL CYS VAL LEU ALA HIS HIS SEQRES 10 B 146 PHE GLY LYS GLU PHE THR PRO PRO VAL GLN ALA ALA TYR SEQRES 11 B 146 GLN LYS VAL VAL ALA GLY VAL ALA ASN ALA LEU ALA HIS SEQRES 12 B 146 LYS TYR HIS</p>
---	---

Γ. Δευτεροταγής δομή (σύμφωνα με τους συγγραφείς)

Πλήθος ελίκων ανά αλυσίδα	Αλυσίδα A: 10 Αλυσίδα B: 10
% ελικοειδούς δομής ανά αλυσίδα	Αλυσίδα A: 76% Αλυσίδα B: 77%
Πλήθος καταλοίπων σε έλικες ανά αλυσίδα	Αλυσίδα A: 108 Αλυσίδα B: 113
Πλήθος β-πτυχωτών επιφανειών ανά αλυσίδα	Αλυσίδα A: 0 Αλυσίδα B: 0
% δομής πτυχωτής επιφάνειας ανά αλυσίδα	Αλυσίδα A: 0% Αλυσίδα B: 0%
Πλήθος καταλοίπων σε β-πτυχωτές επιφάνειες ανά αλυσίδα	Αλυσίδα A: 0 Αλυσίδα B: 0

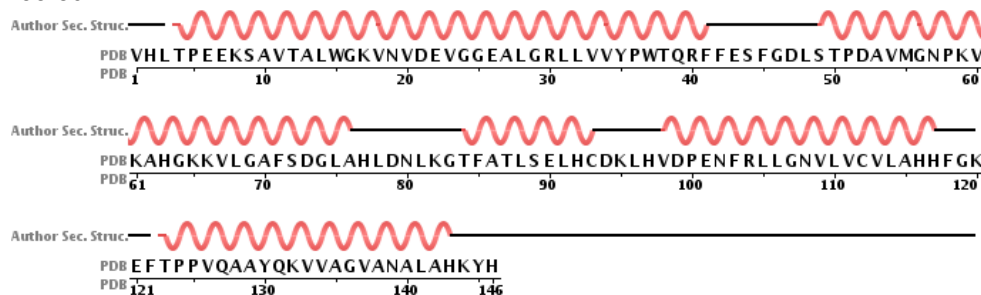
Γράφημα δευτεροταγούς δομής από PDB ανά αλυσίδα

Αλυσίδα A



Author Sec. Struc. Legend
H: alpha helix

Αλυσίδα B

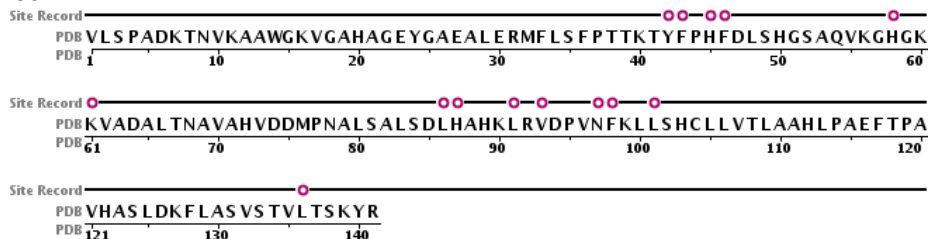


Author Sec. Struc. Legend
H: alpha helix

Δ. Περιοχές (sites) ενδιαφέροντος

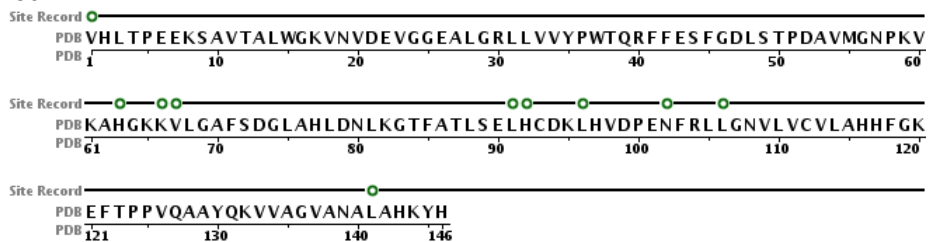
Περιοχές ενδιαφέροντος ανά αλυσίδα

Αλυσίδα A



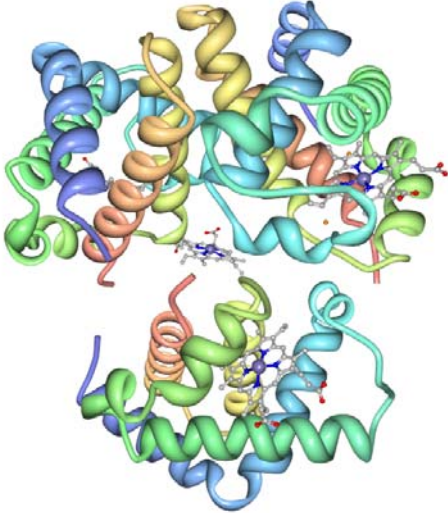
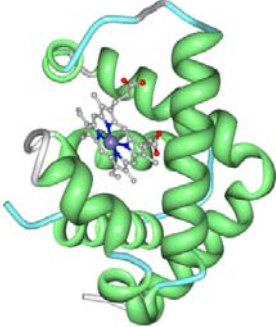
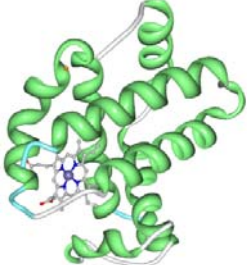
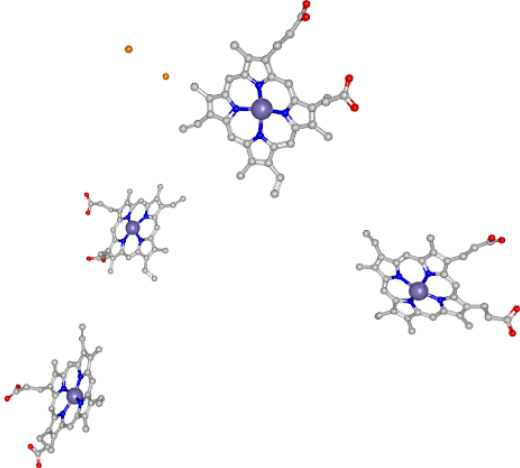
Site Record Legend
○ BINDING SITE FOR RESIDUE HEM A 142 (SOFTWARE)

Αλυσίδα B



Site Record Legend
○ BINDING SITE FOR RESIDUE P04 D 147 (SOFTWARE)
○ BINDING SITE FOR RESIDUE HEM D 148 (SOFTWARE)

Ε. Γραφικές αποτυπώσεις

<p>Γραφική αποτύπωση της συνολικής δομής.</p> <ol style="list-style-type: none">1. Πρωτεΐνες με μορφή ribbon και χρωματισμένη με το σύστημα Chain Color Ramp [Χρώματα της ίριδας από το Ν-τελικό αμινοξύ (μπλε) προς το C-τελικό αμινοξύ (κόκκινο)]2. Άλλα μόρια ή DNA με μορφή Atoms & Bonds3. Μόρια νερού μη ορατά	
<p>Γραφική αποτύπωση κάθε αλυσίδας.</p> <ol style="list-style-type: none">1. Πρωτεΐνες με μορφή ribbon και χρωματισμένη ανάλογα με τη δευτεροταγή δομή α (Conformation type).2. Άλλα μόρια ή DNA που εντάσσονται σε κάθε αλυσίδα με μορφή Atoms & Bonds3. Μόρια νερού μη ορατά	<p>Αλυσίδα Α</p>  <p>Αλυσίδα Β</p> 
<p>Γραφική αποτύπωση όλων των άλλων μορίων</p> <ol style="list-style-type: none">1. Πρωτεΐνες μη ορατές2. Άλλα μόρια ή DNA με μορφή Atoms & Bonds3. Μόρια νερού μη ορατά	

ΣΤ. Σχόλια

--