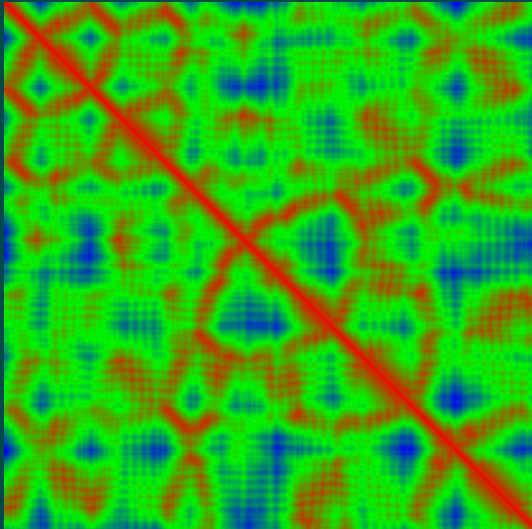
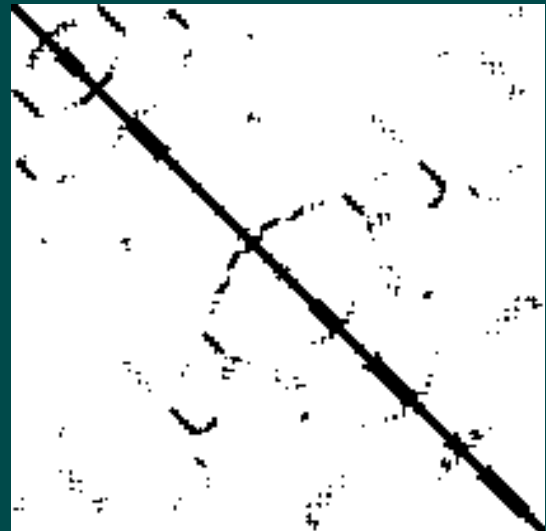


1AUG

DISTANCE MATRIX

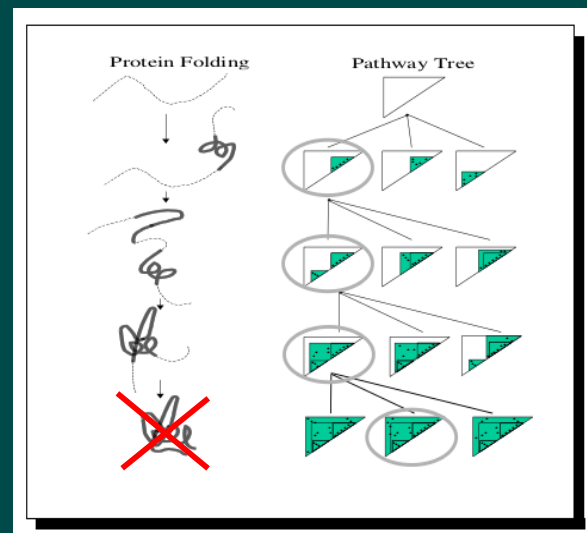
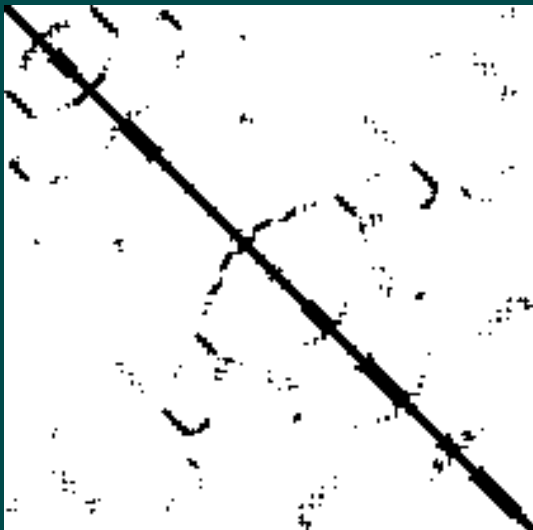


CONTACT MAP



PDB -> CM

Kontakty – proč jsou zajímavé ?



CM -> PDB ?

Kontakty – proč jsou zajímavé ?

Kontaktní mapa obsahuje informace, které silně omezují možné konformace studovaného proteinu.

Předpovídání kontaktních map ze sekvence je tak vhodným nástrojem k předpovídání struktury proteinů ze sekvence.

Kontakty – proč jsou zajímavé ?

In an ideal world...

We would simulate protein folding with

- ultra-fast computers
- accurate force-fields

But in reality we have to try shortcuts

Kontakty – proč jsou zajímavé ?

Shortcuts for ab initio prediction

Simplified models

Fragment assembly

Secondary structure prediction

Contact map prediction



Kontakty – co představují ?



Kontakty – co představují ?

Pokud si kontakt definujeme jako místo, kde vzdálenost mezi atomy dvou různých aminokyselin daného proteinu je menší než cca 5 Å, pak představují fyzikální a chemické interakce (vazby) uvnitř proteinu.

- peptidická vazba ~ 1.33 Å, 400 kJ/mol – silná kovalentní vazba (triviální, protože párování je definováno sekvencí)
 - disulfidické (cysteinové) vazby (můstky) – slabá kovalentní vazba 220 kJ/mol , ~ 2 Å
 - vodíkové vazby 1-3 Å, 5-50 kJ/mol
 - elektrostatické interakce < 5 Å < 50 kJ/mol ($1/r^2$)
 - hydrofóbní efekt – nepolárním částem, které nevytváří vodíkové či jiné vazby nesvědčí interakce s okolím (voda)
 - van der Waalsovy síly – repulze na blízké vzdálenosti, přitažlivý dipólový efekt 4-6 Å, 0.5-1kJ/mol
-

Kontakty – co představují ?

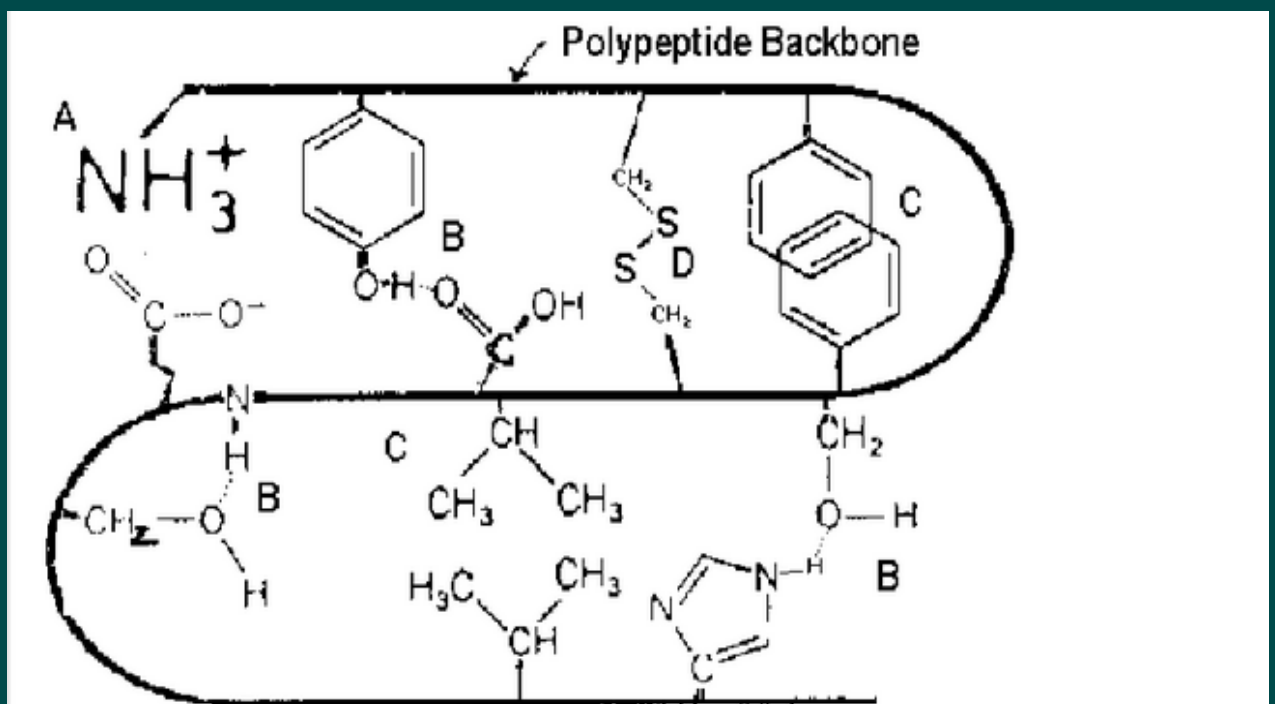


Figure 2. Summary of the Bonding Stabilizing Protein Structure. A. Ionic bond; B. Hydrogen bond (3 types shown); C. Hydrophobic interaction (2 forms shown - lower is cluster type, while upper is Pi-bond type); D. Disulfide bond.