

Určování torzních úhlů - Nukleotidy

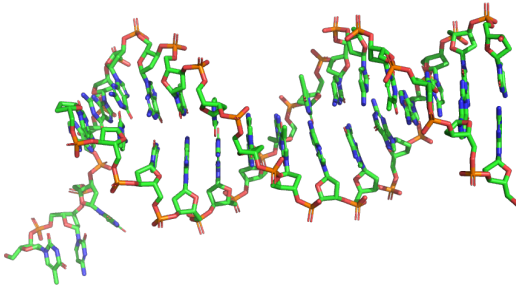
C9531 - Seminář k přednášce Strukturní biochemie

Viktor Bartošík, 484477@mail.muni.cz

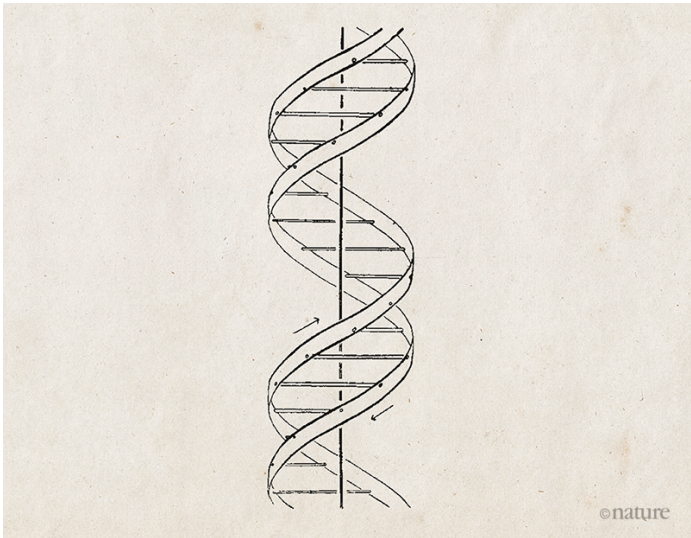
Přírodovědecká fakulta Masarykovy univerzity

6. října 2023

DNA



Obrázek: Dvoušroubovice B-DNA *Escherichia coli*, PDBcode:5c5j



Obrázek: Nákres dvoušroubovice z ruky manželky F. Cricka, Odile, Watson, J. D. & Crick, F. H. C. Nature 171, 737–738 (1953)

Nukleotidy

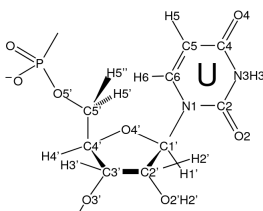
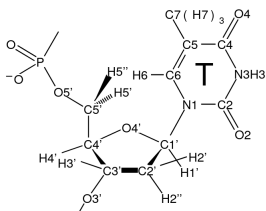
Nukleotid se skládá z pětiuhlíkatého monosacharidu - **pentózy**

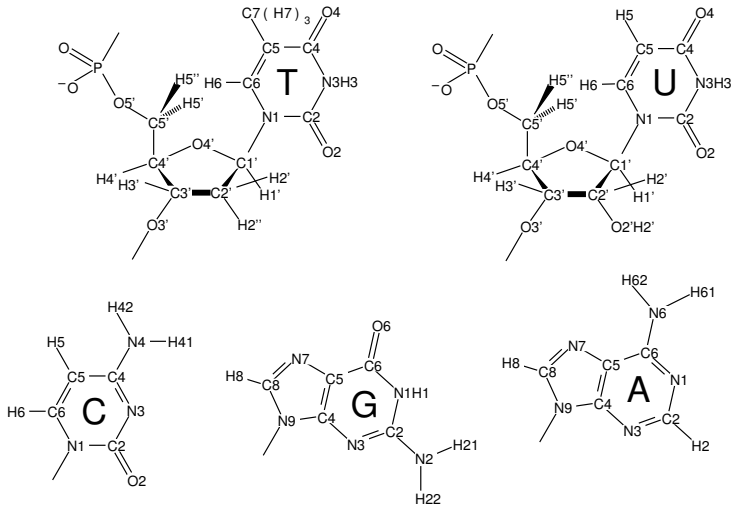
- esterovou vazbou je připojena kyselina fosforečná
- N-glykosidickou vazbou se váže aromatický heterocyklus - **báze**

Pentóza zaujímá v živých systémech 2 varianty - ribóza a deoxyribóza

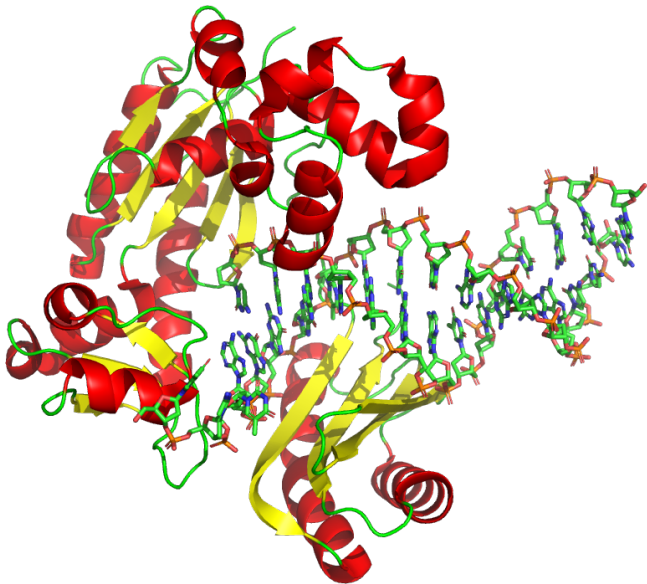
Báze mají 5 typů

- Puriny - Adenin a Guanin
- Pyrimidiny - Cytosin; Thymin (DNA)/Uracil (RNA)





Obrázek: Podrobná struktura nukleotidů, puriny Guanin a Adenin, pyrimidiny Thymin, Uracil a Cytosin, nahoře vlevo **deoxyribose**, vpravo **ribose**



Obrázek: DNA dependentní RNA polymeráza bakterie *Escherichia coli*,
PDBcode:5c5j

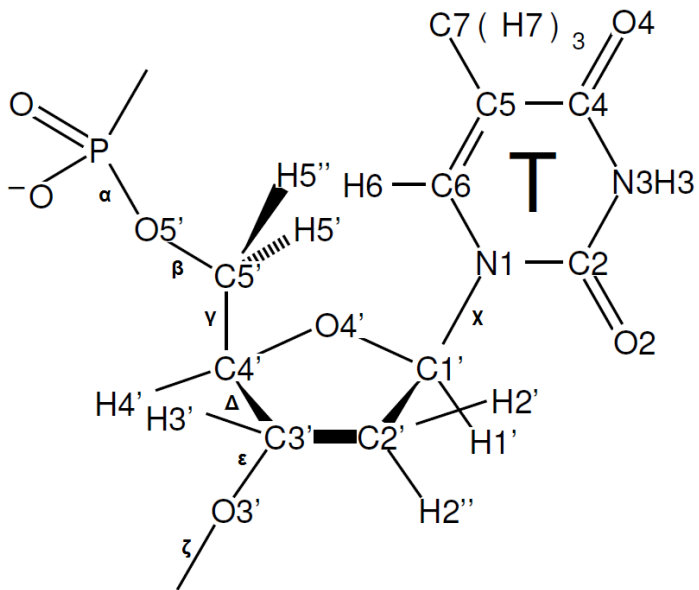
Torzní úhly

V páteři nukleotidů se oproti peptidům nachází mnohokrát více torzních úhlů, jsou to:

- α definovaný atomy: $O3'_{i-1}, P_i, O5'_i, C5'_i$
- β definovaný atomy: $P_i, O5'_i, C5'_i, C4'_i$
- γ definovaný atomy: $O5'_i, C5'_i, C4'_i, C3'_i$
- δ definovaný atomy: $C5'_i, C4'_i, C3'_i, O3'_i$
- ϵ definovaný atomy: $C4'_i, C3'_i, O3'_i, P_{i+1}$
- ζ definovaný atomy: $C3'_i, O3'_i, P_{i+1}, O5'_{i+1}$

a dále úhel nukleové báze:

- χ definovaný atomy: $O4'_i, C1'_i, N1_i, C2_i$ u pyrimidinů (C, T, U)
- χ definovaný atomy: $O4'_i, C1'_i, N9_i, C4_i$ u purinů (A, G)



Konformace pentósového kruhu - Pseudorotační fáze

C1', C2', C3', C4', O4'

twisted × enveloped

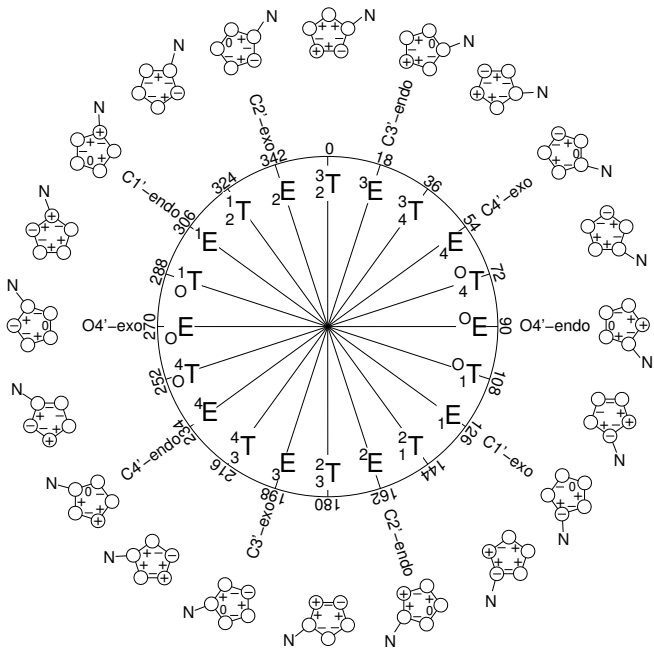
twisted: 3 v rovině, 1 nad, 1 pod

enveloped: 4 v rovině, 1 nad nebo pod

endo × exo

endo: nad rovinou

exo: pod rovinou



**MASARYKOVA
UNIVERZITA**