

Πρωτεϊνική Μηχανική - 1η εργασία

Εύρεση και μελέτη μεταβολικού μονοπατιού

Στόχος της παρούσας εργασίας είναι η εξοικείωση με κάποιες από τις βάσεις δεδομένων που έχουν παρουσιαστεί στο σεμινάριο, και η ανάκτηση πληροφοριών από αυτές.

Τα βήματα της εργασίας είναι τα εξής:

1. Επιλέξτε ένα μόριο με βιολογική δραστικότητα που σας ενδιαφέρει. Θα μπορούσε να είναι φυσικό προϊόν είτε κάποια συνθετική ένωση. Από βιβλιογραφία (PubMed, Scopus κ.ά.) να βρείτε πληροφορίες για τη βιολογική δραστικότητα και την εφαρμογή του τελικού προϊόντος και γιατί είναι χρήσιμο να το συνθέσουμε.
2. Χρησιμοποιώντας τις βάσεις δεδομένων KEGG, RetroBioCat και Rhea να βρείτε συνθετικά μονοπάτια που μπορούν να μας οδηγήσουν στην συγκεκριμένη ένωση. Αν είναι φυσικό προϊόν, από την KEGG μπορείτε να εντοπίσετε το μεταβολικό μονοπάτι, η Rhea και το RetroBioCat μπορεί να σας δώσουν στοιχεία για εναλλακτικά μονοπάτια. Να δοθούν οι δομές των ενδιάμεσων μορίων και να αναφερθούν τα ένζυμα τα οποία καταλύουν το κάθε βήμα. Πόσα ένζυμα χρειάζονται; Ποια είναι αυτά; Σε τι EC κατηγορία ανήκουν; Χρειάζονται συμπαραγόντα, και αν ναι, ποιον;
3. Επιλέξτε ένα μονοπάτι να αναλύσετε, ξεκινώντας από φθηνή πρώτη ύλη και πιθανώς γνωστά/χαρακτηρισμένα ένζυμα.
4. Από τα ένζυμα του μονοπατιού, επιλέξτε ένα (όποιο επιθυμείτε). Βρείτε την αλληλουχία γονιδίου που κωδικοποιεί το επιλεγμένο ένζυμο. Αν υπάρχουν αρκετές αλληλουχίες στην KEGG, μπορείτε να βασιστείτε στη βιβλιογραφία και να επιλέξετε αυτό που χρησιμοποιείται συχνότερα στη βιβλιογραφία, δίνοντας το λόγο της επιλογής (π.χ. σταθερότητα, αυξημένη δραστικότητα, μη εμφάνιση αναστολής προϊόντος κτλ). Παραθέστε την αλληλουχία του γονιδίου, και την κωδικοποιούσα αμινοξική αλληλουχία.
5. Χρησιμοποιώντας το Protein Parameter, υπολογίστε μοριακό βάρος, pI, υπολογίστε σταθερότητα, συντελεστή απορρόφησης (ανάλογα με τον αριθμό των αρωματικών αμινοξέων της αλληλουχίας).
6. Χρησιμοποιήστε το εργαλείο SoluProt για να ελέγξετε κατά πόσο η αλληλουχία μπορεί να εκφραστεί με διαλυτό τρόπο σε *E. coli*.

Παραδοτέο για κάθε ομάδα είναι μία παρουσίαση με τα συγκεκριμένα δεδομένα.

Ενδεικτικά μόρια: Κερσετίνη, Κορτιζόνη, Ντοπαμίνη, Ρεσβερατρόλη, Ταυρίνη, Τορουλένιο, Βιταμίνη Α

Καλή επιτυχία!

Ενδεικτική ημερομηνία παρουσίασης: 3/4/2025