

Σχετικός προσανατολισμός των ηλεκτρικών διπολικών ροπών πρωτεϊνών σε πρωτεϊνικά σύμπλοκα.

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Στις περισσότερες βιολογικές διεργασίες υπάρχει η ανάγκη συνεργασίας πρωτεϊνών, οι οποίες δρουν σε συνδυασμό. Τα πρωτεϊνικά σύμπλοκα μπορούν να σχηματιστούν με τη δράση μη ομοιοπολικών αλληλεπιδράσεων, συμπεριλαμβανομένων των δεσμών υδρογόνου, Van-der Waals και ηλεκτροστατικών αλληλεπιδράσεων. Στα πλαίσια της κατανόησης της αλληλεπίδρασης των πρωτεϊνών έχουν αναπτυχθεί πειραματικές τεχνικές υψηλής απόδοσης για την ανίχνευση του σχετικού προσανατολισμού των πρωτεϊνών που αλληλεπιδρούν. Την αδυναμία των πειραματικών τεχνικών να ορίσουν το πώς οι πρωτεΐνες αλληλεπιδρούν έρχονται να καλύψουν οι επιστήμονες με την ανάπτυξη υπολογιστικών μεθόδων ικανών να προβλέψουν με αυτόματο τρόπο την τριδιάστατη δομή των πρωτεϊνικών συμπλόκων, όπως το docking πρωτεϊνών.

Στόχος μας ήταν να μελετηθεί ο σχετικός προσανατολισμός των ηλεκτρικών διπολικών ροπών των πρωτεϊνών σε πρωτεϊνικά σύμπλοκα. Μια παράμετρος που θα μπορούσε να χρησιμοποιηθεί στο docking πρωτεϊνών για να αναδείξει τις περισσότερο πιθανές αλληλεπιδράσεις. Στο πλαίσιο αυτής της μελέτης προέκυψαν κατανομές πιθανοτήτων των γωνιών που σχηματίζουν οι ηλεκτρικές διπολικές ροπές των πρωτεϊνών στα σύμπλοκα που μπορούν να χρησιμοποιηθούν για την βελτίωση των αποτελεσμάτων που παίρνουμε από το docking πρωτεϊνών.