

Abstrakt

Dokonalá znalost nekovalentních interakcí aminokyselin uvnitř proteinové struktury je esenciální pro úplné pochopení jeho konformace, stability a funkce. Mezi všemi aminokyselinami, které obvykle tvoří protein, se tryptofan vyjímá jednak svojí vzácností, ale také velikostí postranního řetězce tvořeného indolovou skupinou. Ta je schopna zajišťovat různé typy nepostradatelných interakcí uvnitř proteinu, mezi různými polypeptidovými řetězci, ale také třeba mezi proteinem a biologickou membránou. Navíc se jedná o nejčastěji využívaný přirozený bílkovinný fluorofor.

Ke studiu aminokyselinových interakcí se běžně využívají databáze vyřešených proteinových struktur, nad kterými se vytváří více či méně komplexní analýzy. Takto již byly nalezeny mnohé nekovalentní interakce, které mohou mezi tryptofanem a ostatními aminokyselinami nastávat. Většina těchto analýz se ale soustřeďuje na studium konkrétní interakce a nezabývá se prostředím tryptofanu jako celku, kde se všechny aminokyseliny vzájemně ovlivňují.

Pomocí nově vytvořených postupů jsou v této práci analyzovány profily výskytu jednotlivých aminokyselin okolo indolové skupiny tryptofanu a výsledky porovnány s dostupnou literaturou. Aminokyselina, která má největší preferenci k tryptofanu, se ukázala být opět tryptofan a tyto dvojice tryptofanů jsou podrobeny detailní analýze.

K závěrům mé práce mimo jiné patří zjištění, že arginin a lysin vykazují v literatuře popisovanou kationt- π interakci, ale zvýšeným výskytem se v jeho okolí neprojevují. Naproti tomu aniont- π interakci v kombinaci s tryptofanem jsem nepozoroval a domnívám se, že jde v literatuře o chybné výsledky.

Analýza tryptofanových párů ukázala, jak strukturovaný je interakční prostor okolo tryptofanu. Jedná se o různé vrstvy, kde vždy převažuje určitá orientace indolových skupin tryptofanů. Takovéto nenáhodné rozdělení se nachází až do vzdálenosti 10 Å mezi indoly. Proto pro všechny analýzy vlastností prostoru okolo tryptofanu (pravděpodobně i jiných aminokyselin) je potřeba postupovat pouze v určitých konkrétních směrech, a to i do větších vzdáleností a neomezovat se na průzkum průměrných vlastností celého okolního prostoru najednou.