

Název: Vliv fosforylace na konformaci peptidů a proteinů

Autor: Ing. Veronika Jurásková

Katedra: Katedra fyzikální a makromolekulární chemie

Vedoucí práce: RNDr. Jiří Vondrášek, CSc.

Konzultant: Mgr. Jiří Vymětal, PhD.

Abstrakt: V předkládané práci jsem se zabývala studiem vlivu fosforylace na konformaci peptidů a proteinů. Zaměřila jsem se na tři nejčastěji fosforylované aminokyseliny - serin, threonin a tyrosin. Pomocí metadynamiky jsem studovala změnu konformace vlivem fosforylace u jednoduchých dipeptidů a také složitějších pentapeptidů. Zjistila jsem, že fosforylace jednotlivých aminokyselin vede ke strukturním změnám, které jsou charakteristické pro každou aminokyselinu. Zatímco fosforylace serinu zvyšuje preferenci pravotočivého alfa helixu, fosforylace threoninu vede k extendované struktuře a konformace tyrosinu není fosforylací ovlivněna. Dále jsem studovala změnu konformace serinu v delších peptidech získaných z fosforylačních míst nestrukturovaných proteinů pomocí klasické dynamiky. Pokusila jsem simulovat také fosforylované a nefosforylované varianty proteinů se známou strukturou publikovanou v RCSB PDB databázi. Získané výsledky jsem poté porovnávala s dostupnými výpočetními a experimentálními daty.

Klíčová slova: fosforylace, dipeptidy, pentapeptidy, metadynamika, molekulová dynamika, posttranslační modifikace