

# Βιοπληροφορική

## Ενότητα 2: Βασικές αρχές βιολογίας

Αν. καθηγήτης Αγγελίδης Παντελής

e-mail: [paggelidis@uowm.gr](mailto:paggelidis@uowm.gr)

ΕΕΔΙΠ Μπέλλου Σοφία

e-mail: [sbellou@uowm.gr](mailto:sbellou@uowm.gr)

Τμήμα Μηχανικών Πληροφορικής και Τηλεπικοινωνιών

---



# Άδειες Χρήσης

---

- Το παρόν εκπαιδευτικό υλικό υπόκειται σε άδειες χρήσης Creative Commons.
- Για εκπαιδευτικό υλικό, όπως εικόνες, που υπόκειται σε άλλου τύπου άδειας χρήσης, η άδεια χρήσης αναφέρεται ρητώς.



# Χρηματοδότηση

- Το παρόν εκπαιδευτικό υλικό έχει αναπτυχθεί στα πλαίσια του εκπαιδευτικού έργου του διδάσκοντα.
- Το έργο «**Ανοικτά Ψηφιακά Μαθήματα στο Πανεπιστήμιο Δυτικής Μακεδονίας**» έχει χρηματοδοτήσει μόνο τη αναδιαμόρφωση του εκπαιδευτικού υλικού.
- Το έργο υλοποιείται στο πλαίσιο του Επιχειρησιακού Προγράμματος «Εκπαίδευση και Δια Βίου Μάθηση» και συγχρηματοδοτείται από την Ευρωπαϊκή Ένωση (Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο) και από εθνικούς πόρους.



Ευρωπαϊκή Ένωση  
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο



Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



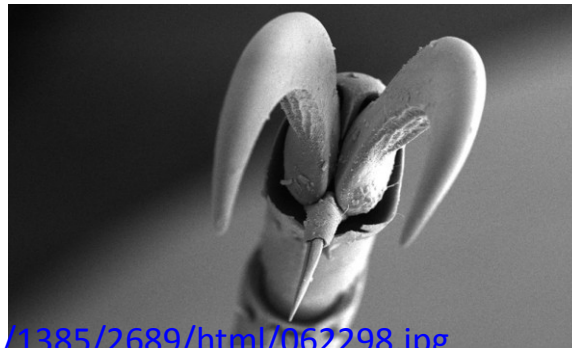
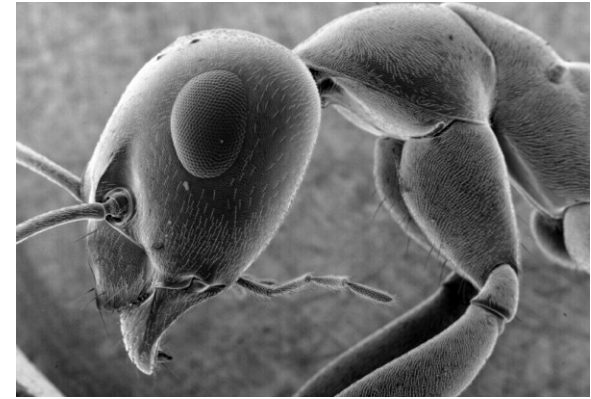
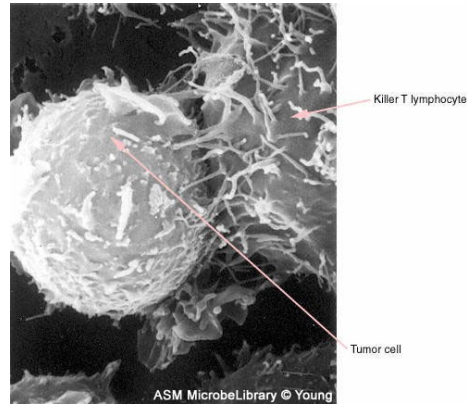
# Σκοπός του μαθήματος

---

- Επίπεδα δομής της ζωής.
- Τι είναι κύτταρο.
- Τι είναι το DNA.
- Τι είναι οι πρωτεΐνες. Δομή πρωτεϊνών.
- Βιο-πληροφορίες.



# Βασικές αρχές βιολογίας

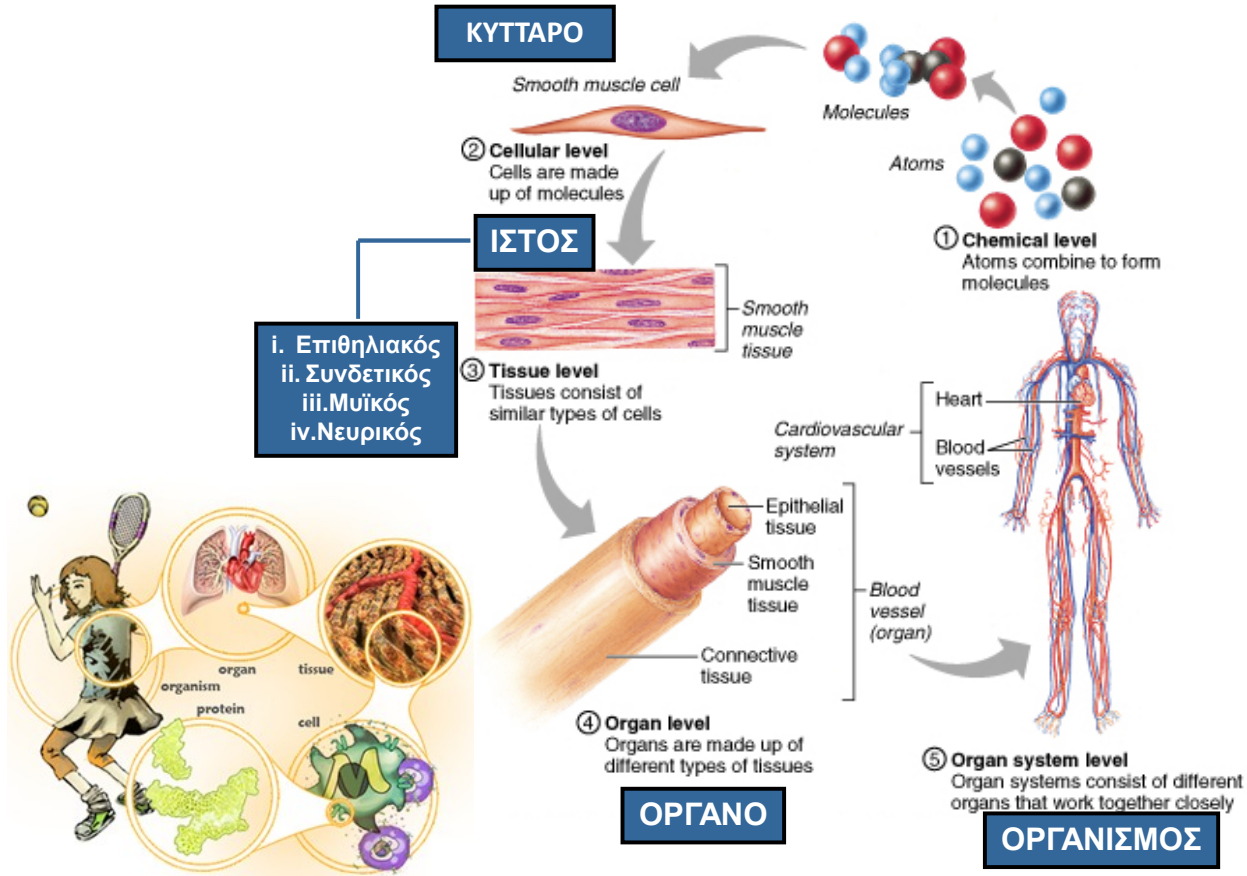


Πηγές εικόνων:

- <http://www.iran-daily.com/1385/2689/html/062298.jpg>
- <http://www.pazinauka.com/img01/mikro-svet09.jpg>
- <http://pixdaus.com/pics/1214503445NTE7C66.jpg>
- <http://img3.nnm.ru/imagez/gallery/5/7/b/a/8/57ba81ed508a14a8734d01f8da24f418.jpg>



# Επίπεδα δομής (1/2)



Πηγή:

<http://>

[www.webquest.hawaii.edu/kahihi/sciencedictionary/images/cellorganbodydiagram.png](http://www.webquest.hawaii.edu/kahihi/sciencedictionary/images/cellorganbodydiagram.png)



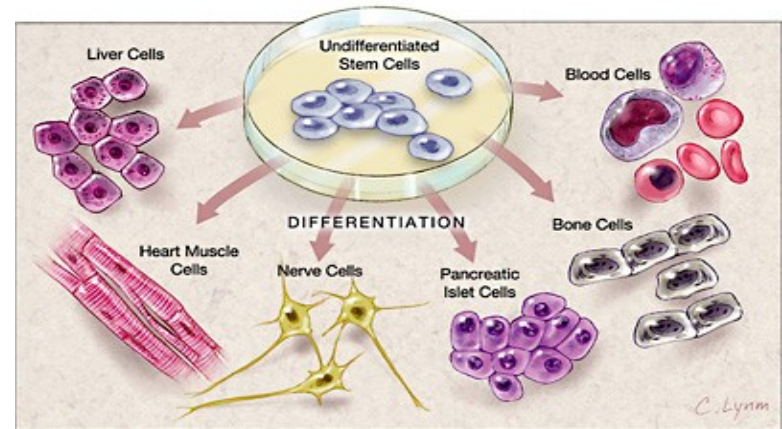


# Διαφορετικά είδη κυττάρων

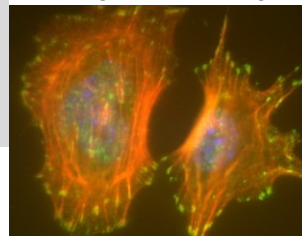
- Διαφορετικά είδη κυττάρων αποτελούν τα **δομικά** στοιχεία του οργανισμού.

Πηγές εικόνων:

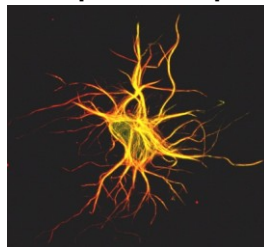
[http://www.expertsmind.com/CMSImages/2090\\_epithelial%20tissue.png](http://www.expertsmind.com/CMSImages/2090_epithelial%20tissue.png)



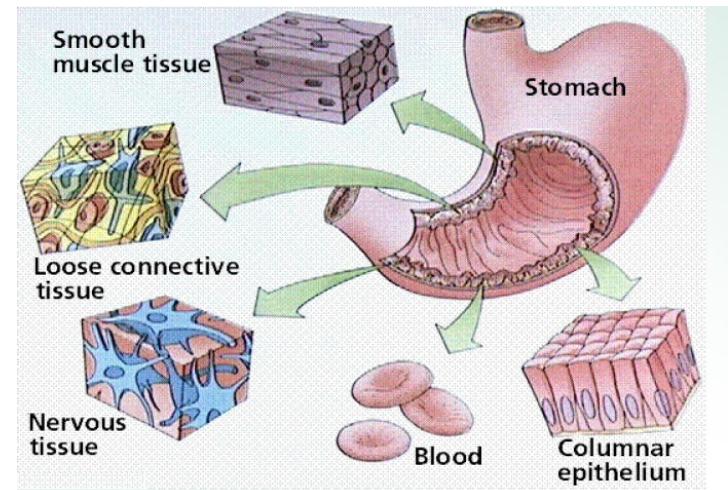
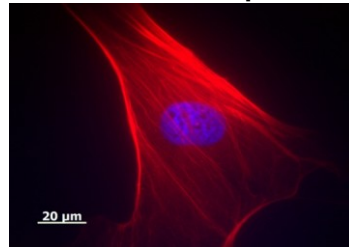
Επιθηλιακά κύτταρα



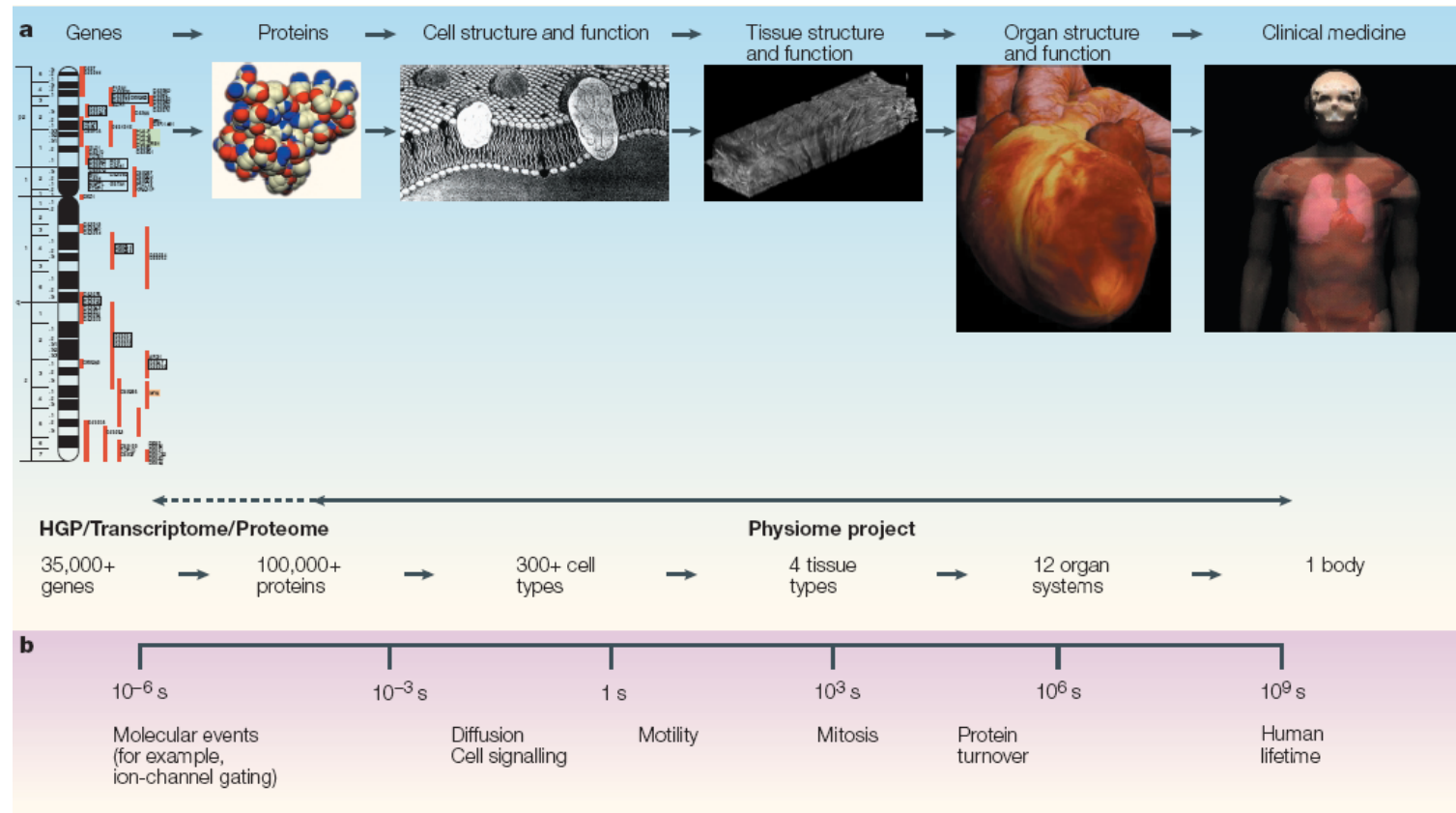
Νευρικά κύτταρα



Μυϊκά κύτταρα



# Επίπεδα δομής (2/2)



Hunter et. al., *Molecular Cell Biology*, 4:237-243, 2003

Πηγή: [http://people.eku.edu/ritchisong/301images/Levels\\_organization3.jpg](http://people.eku.edu/ritchisong/301images/Levels_organization3.jpg)

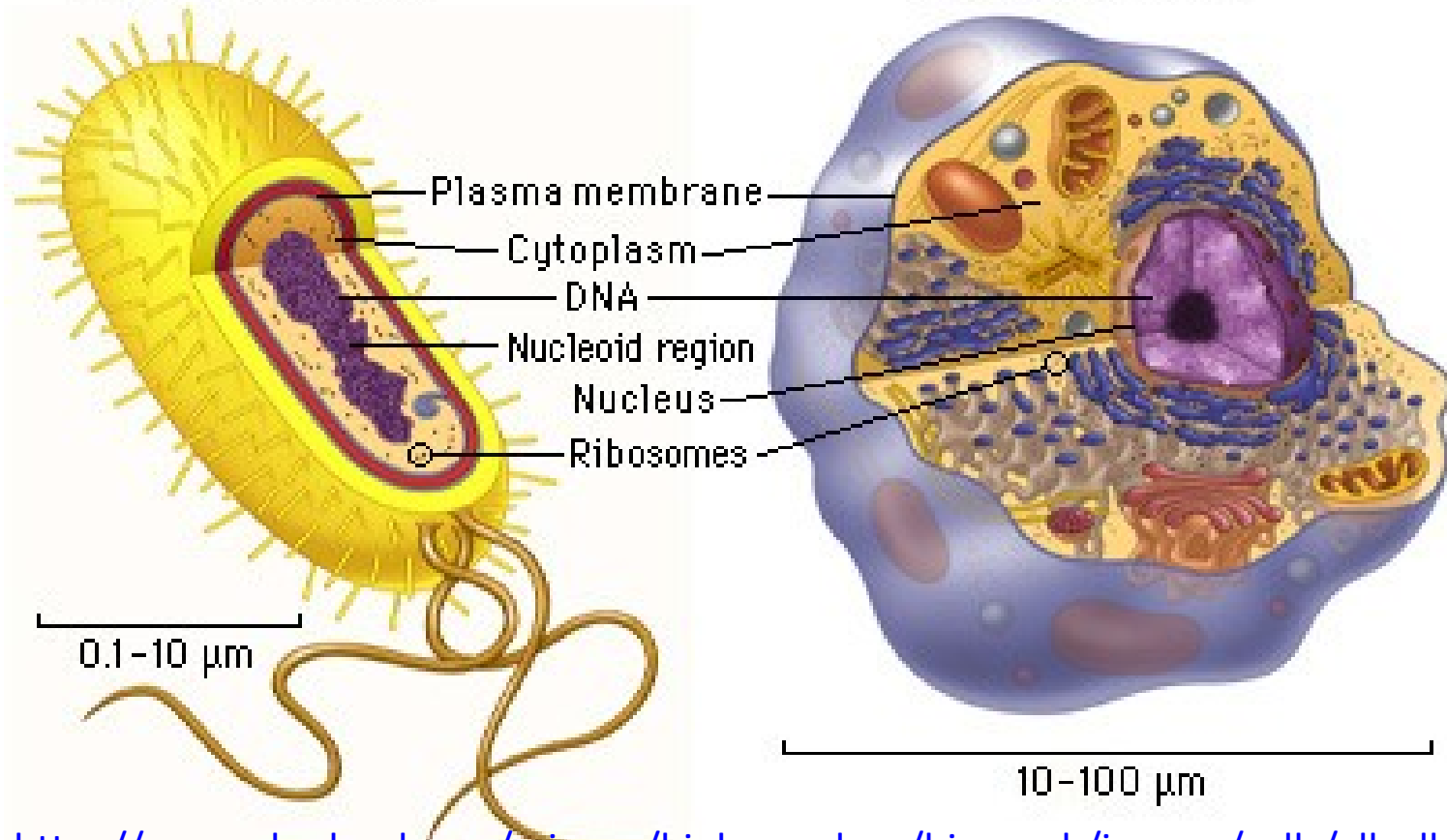




# Prokaryotic vs. Eukaryotic cell

Prokaryotic cell

Eukaryotic cell

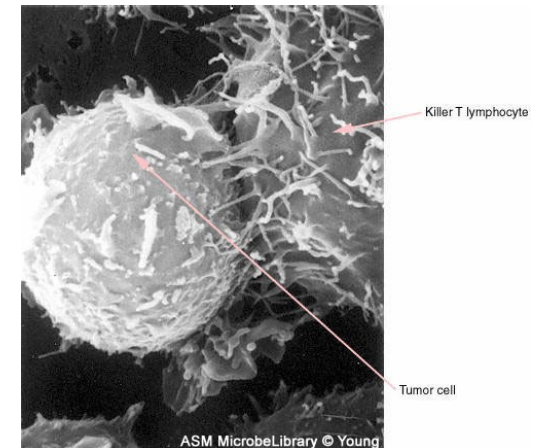
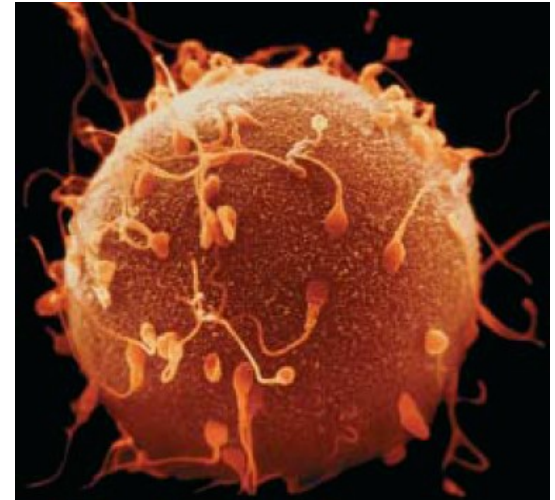


Πηγή: [http://www.phschool.com/science/biology\\_place/biocoach/images/cells/allcell.jpg](http://www.phschool.com/science/biology_place/biocoach/images/cells/allcell.jpg)



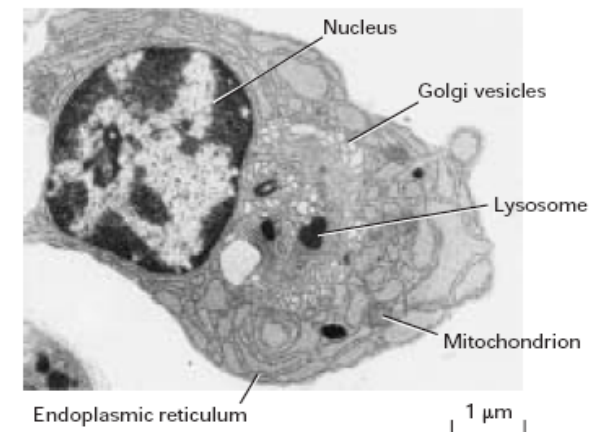
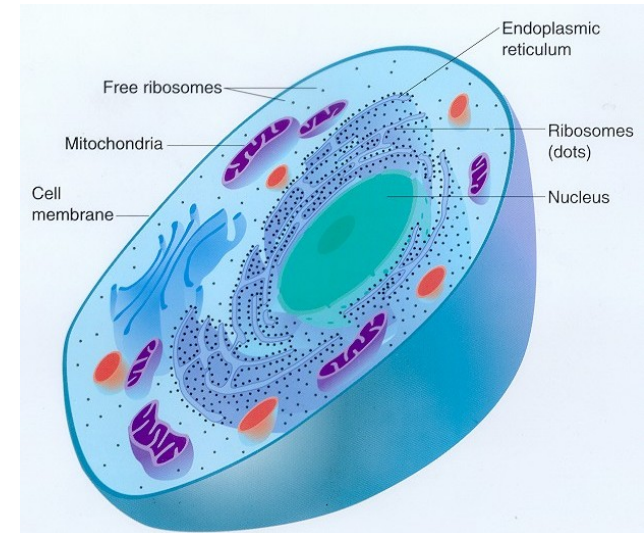
# Το Ευκαριωτικό Κύτταρο (1/2)

- Η **βασική μονάδα** της ζωής είναι το κύτταρο.
- Όλοι οι ζωντανοί οργανισμοί αποτελούνται από ένα ή περισσότερα κύτταρα.
- Το ανθρώπινο σώμα περιέχει περίπου 100 τρισεκατομμύρια ( $100 \times 10^{12}$ ) κύτταρα.
- Υπάρχουν περίπου 300 διαφορετικά είδη κυττάρων στο ανθρώπινο σώμα.
- Τα διαφορετικά είδη κυττάρων έχουν διαφορετικά χαρακτηριστικά, αλλά τα περισσότερα αποτελούνται από οργανίδια και διάφορα μακρομόρια, όπως πρωτεΐνες, λιπίδια, υδατάνθρακες και νουκλεϊκά οξέα.
- Τα οργανίδια αποτελούνται από αυτά τα μακρομόρια, τα οποία είναι πολυμερή μικρότερων μορίων που αποτελούνται από άτομα διαφόρων χημικών στοιχείων.



# Το Ευκαριωτικό Κύτταρο (2/2)

- **Πυρήνας:** Περιέχει το DNA, δηλ. τις γενετικές πληροφορίες του κυττάρου.
- **Μιτοχόνδρια:** Παράγουν ενέργεια από τις τροφές για τις ανάγκες του κυττάρου.
- **Ενδοπλασματικό δίκτυο (ΕΔ) :** Ακανόνιστος λαβύρινθος περιβαλλόμενος από μεμβράνη, στον οποίο συντίθενται τα περισσότερα συστατικά της κυτταρικής μεμβράνης.
- **Ριβοσώματα:** Σωματίδια όπου διεκπεραιώνεται ενδοκυττάρια πέψη που οδηγεί σε απελευθέρωση θρεπτικών ουσιών από σωματίδια τροφής.
- **Λυσοσώματα:** Οργανίδια που διεκπεραιώνουν ενδοκυττάρια πέψη που οδηγεί σε απελευθέρωση θρεπτικών ουσιών και σε αποδόμηση ανεπιθύμητων μορίων.
- **Κυτταρική μεμβράνη:** Μέσο επικοινωνίας του κυττάρου με το περιβάλλον.



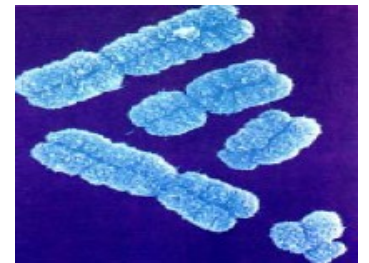
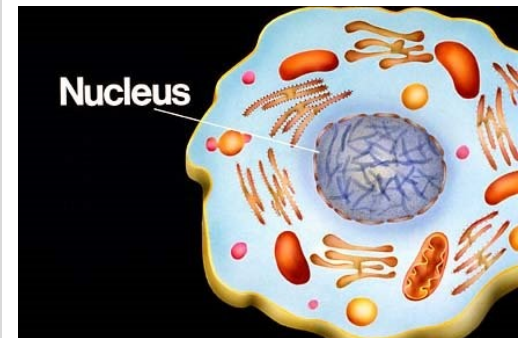
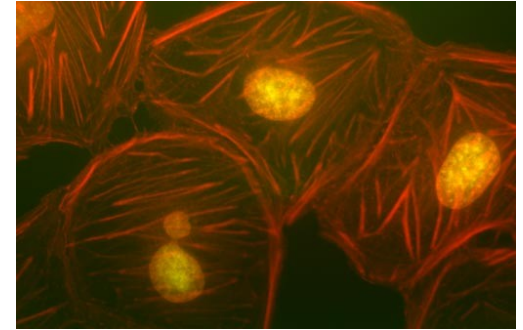
# Πυρήνας (Nucleus)

- Περικλείεται από δύο ομόκεντρες μεμβράνες (πυρηνικό περίβλημα).
- Περιέχει τις γενετικές πληροφορίες του οργανισμού, αποθηκευμένες στη δομή μορίων του DNA.
- Τα γιγαντιαία μόρια του DNA γίνονται ορατά στο φωτονικό μικροσκόπιο με τη μορφή χρωμοσωμάτων, όταν το κύτταρο προετοιμάζεται να διαιρεθεί.
- Σε κάθε ανθρώπινο κύτταρο υπάρχουν 46 χρωμοσώματα (23 από κάθε γονέα).

Πηγές εικόνων:

[http://itg.beckman.illinois.edu/technology\\_development/web\\_atlas/structures/nucleus\\_actin/images/nucleus\\_actin.jpg](http://itg.beckman.illinois.edu/technology_development/web_atlas/structures/nucleus_actin/images/nucleus_actin.jpg)

<http://www.weallhaveuniquebrains.com/wp-content/uploads/2013/11/nucleus.jpg>



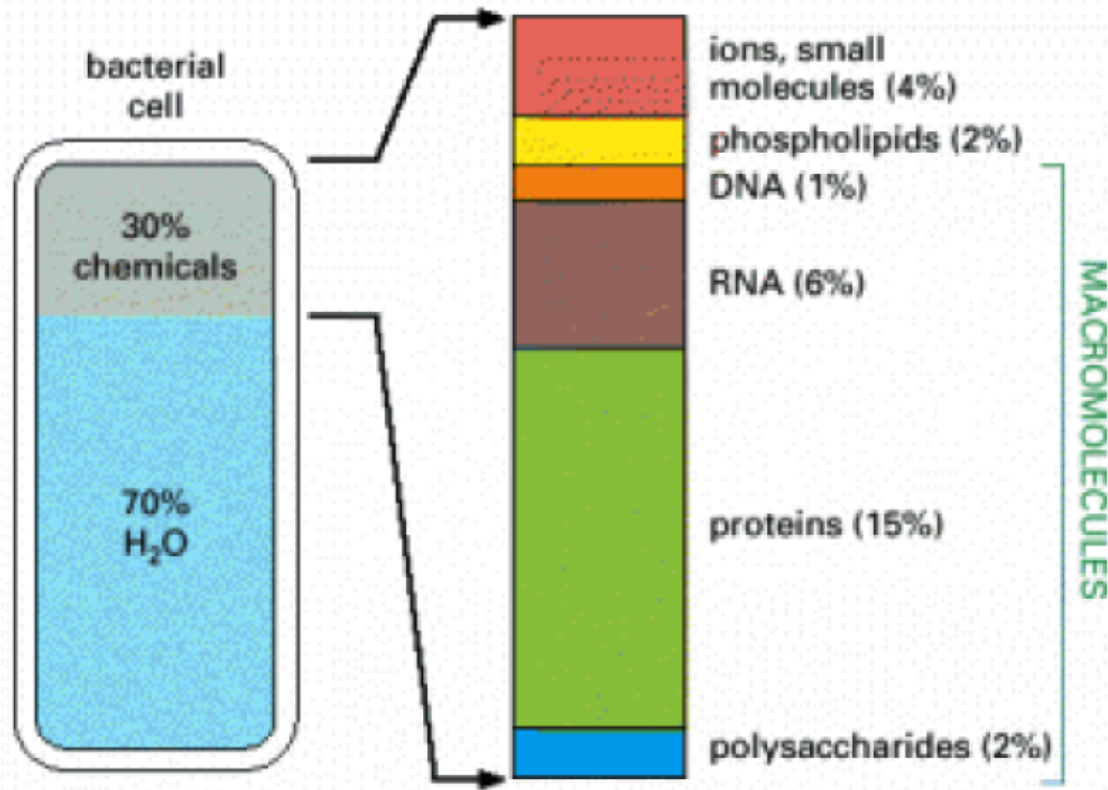
# Το κύτταρο ως δομικός λίθος της ζωής

---

- Διαφορετικά είδη κυττάρων, ωστόσο κοινά χαρακτηριστικά:  
**Γεννιέται, τρέφεται, διπλασιάζεται και πεθαίνει.**
- Οργανωτικές αρχές που ισχύουν σε όλους τους οργανισμούς.  
Ολόκληρη η ζωή του πλανήτη εξαρτάται από 3 τύπους μορίων:
  1. **DNA:** Αποτελεί μία τεράστια βιβλιοθήκη που περιγράφει τον τρόπο λειτουργίας του.
  2. **RNA:** Μεταφέρει ορισμένα μικρά κομμάτια της βιβλιοθήκης σε διαφορετικά σημεία του κυττάρου. Εκεί, οι μικροί όγκοι πληροφοριών χρησιμοποιούνται ως πρότυπα για τη σύνθεση πρωτεϊνών.
  3. **Πρωτεΐνες:** Σχηματίζουν τα ένζυμα που εκτελούν βιοχημικές αντιδράσεις, στέλνουν σήματα σε άλλα κύτταρα, αποτελούν τα κύρια συστατικά του σώματος και εκτελούν την πραγματική εργασία του κυττάρου.



# Χημική σύσταση των κυττάρων (1/2)



Alberts *et al.*, 2002

Molecular Biology of the Cell

- Πηγή: <http://withfriendship.com/images/f/29830/biological-macromolecules.gif>





# Χημική σύσταση των κυττάρων (2/2)

---

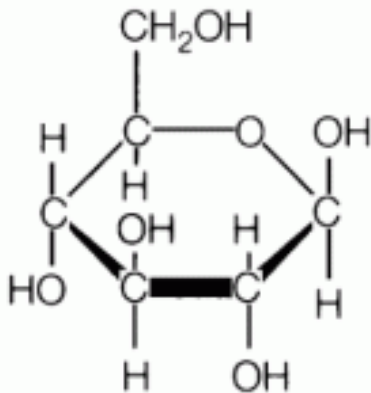
- 70% του κυττάρου είναι νερό.
- Εκτός από το νερό, όλα σχεδόν τα μόρια ενός κυττάρου βασίζονται στον άνθρακα.
  - Τα κύτταρα περιέχουν τέσσερις κύριες οικογένειες μικρών **οργανικών** μορίων.
- **Σάκχαρα (υδατάνθρακες):** Πηγές ενέργειας για τα κύτταρα και δομικά στοιχεία για τους πολυσακχαρίτες. Γενικός μοριακός τύπος:  $(CH_2O)_n$ , όπου  $n=3, 4, 5, 6$  ή  $7$ . π.χ. Γλυκόζη.
- **Λιπαρά οξέα:** Είναι τα συστατικά των λιπιδίων και των κυτταρικών μεμβρανών.
- **Νουκλεϊνικά οξέα:** DNA και RNA. Αποθηκεύουν και ανακαλούν βιολογικές πληροφορίες.
- **Αμινοξέα:** Δομικά στοιχεία των **πρωτεϊνών**. 20 διαφορετικά αμινοξέα δημιουργούν τις πρωτεΐνες.



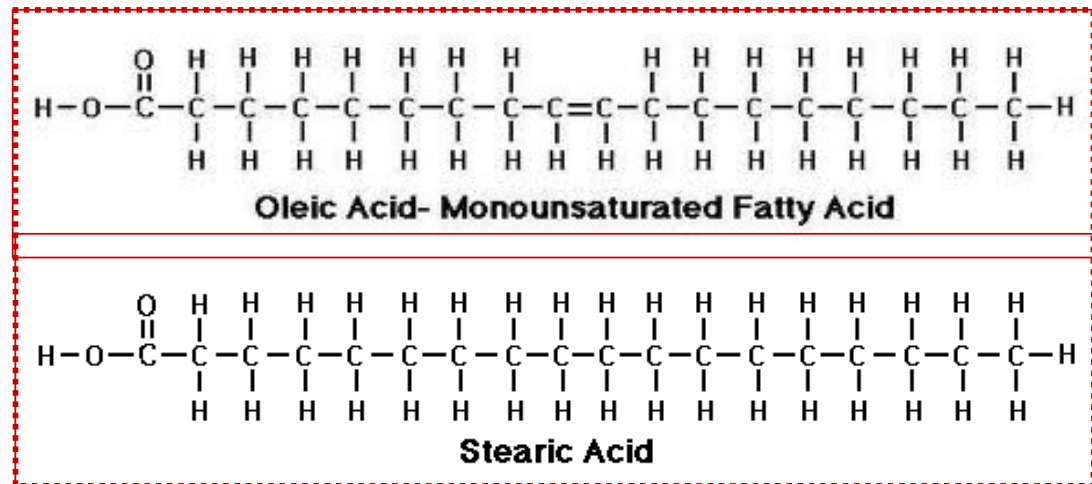
# Δομικοί λίθοι του κυττάρου

- Σάκχαρα → • Πολυσακχαρίτες
- Λιπαρά οξέα → • Λίπη / Λιπίδια / Μembrάνες
- Νουκλεοτίδια → • Νουκλεϊκά οξέα (RNA, DNA)
- Αμινοξέα → • Πρωτεΐνες

## Γλυκόζη - Glucose



## Ολεϊκό (ακόρεστο) & Στεατικό (κορεσμένο λιπαρό οξύ)

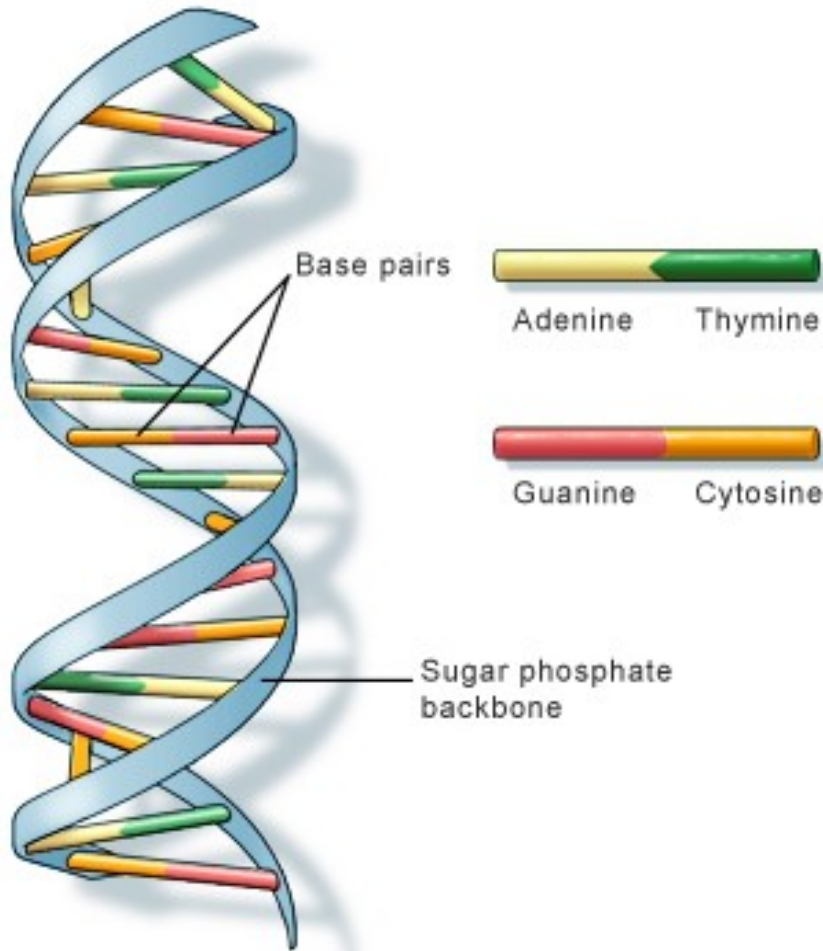


---

Τι είναι το γενετικό υλικό ή DNA;



# DNA: δεοξυριβονουκλεϊκό οξύ (Deoxyribonucleic acid)



## DNA: Φορέας γενετικής πληροφορίας.

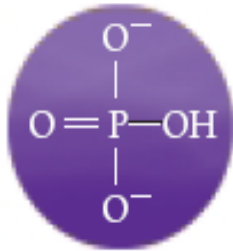
- Αποθηκεύεται στον πυρήνα των κυττάρων.
- Τα δομικά στοιχεία του DNA είναι τα νουκλεοτίδια.
- Η δομή του προσδιορίστηκε το 1953 (Watson & Crick).

Πηγή εικόνας: [http://2.bp.blogspot.com/\\_aza86ytQuKU/Syc8zdjzNHI/AAAAAAAAAEYk/QiLTgr61PyI/s400/dna.gif](http://2.bp.blogspot.com/_aza86ytQuKU/Syc8zdjzNHI/AAAAAAAAAEYk/QiLTgr61PyI/s400/dna.gif)

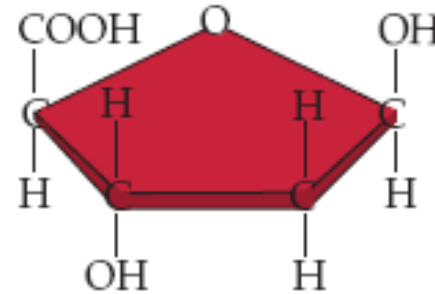


# Κάθε νουκλεοτίδιο αποτελείται από:

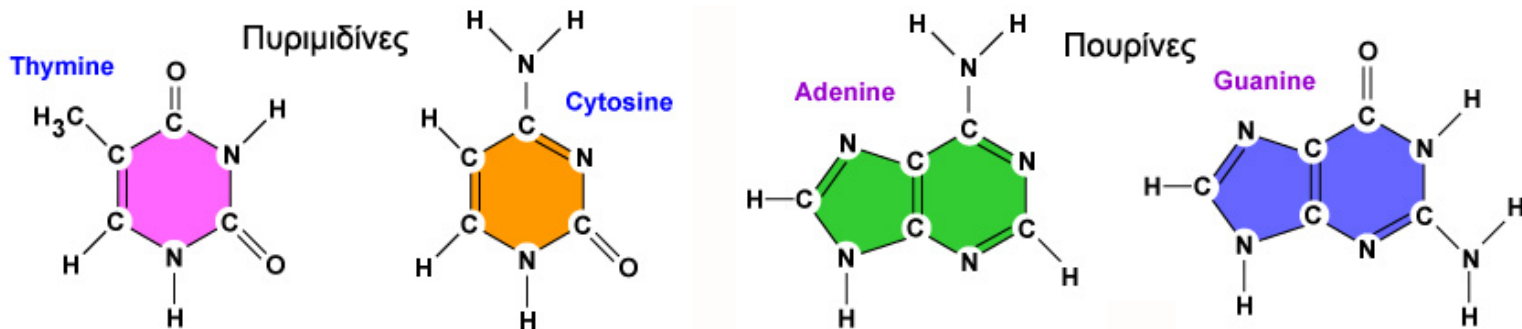
## Φωσφορική ομάδα (P)



## Σάκχαρο



## Αζωτούχα βάση



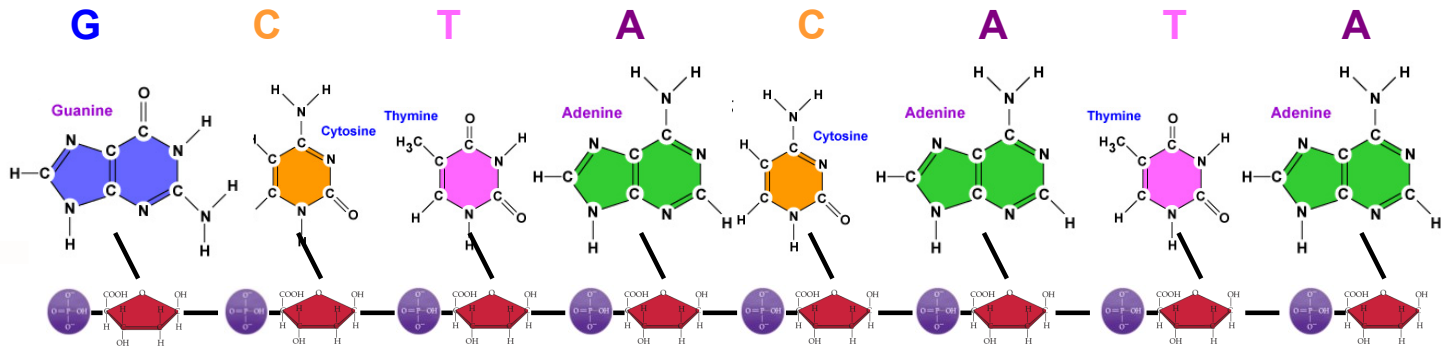
4 αζωτούχες βάσεις: Θυμίνη (T), Κυτοσίνη (C), Αδενίνη (A) και Γουανίνη (G)







# Η Δομή του DNA (2/2)



Αλληλουχία DNA: GCTACATA

4 αζωτούχες βάσεις: Θυμίνη (T), Κυτοσίνη (C), Αδενίνη (A) και Γουανίνη (G)



# MUtAsHONS

## (μεταλλαγμένο MUTATIONS)

---

- Το DNA μπορεί να θεωρηθεί ως μια αλληλουχία (ακολουθία) των νουκλεοτιδίων: C,A,G, ή T.
- Τι συμβαίνει στα γονίδια όταν η αλληλουχία του DNA μεταλλάσσεται;

Κανονική αλληλουχία DNA:

**ATCTAG**



Μεταλλαγμένη αλληλουχία DNA:

**ATCGAG**



# Η καλή, η κακή, και η «σιωπηρή»

- Οι μεταλλάξεις μπορούν να χρησιμεύσουν στον οργανισμό με τρεις τρόπους:
  - Η καλή:
    - Η μετάλλαξη μπορεί να οδηγήσει σε ένα κληρονομικό χαρακτηριστικό που βελτιώνει τη λειτουργία του οργανισμού:
    - Η μετάλλαξη στο γονίδιο του δρεπανοκυττάρου (sickle cell gene) προκαλεί ανθεκτικότητα στην ελονοσία.
  - Η κακή:
    - Μια μετάλλαξη μπορεί να οδηγήσει σε ένα κληρονομικό χαρακτηριστικό που είναι επιβλαβές, ή ακόμα και θανατηφόρο, για τον οργανισμό:
      - Η νόσος του Huntington, ένα αποτέλεσμα γονιδιακής μετάλλαξης, είναι μια εκφυλιστική ασθένεια του νευρικού συστήματος.
  - Η σιωπηρή:
    - Η μετάλλαξη δεν προκαλεί κάποια διαφορά στη λειτουργία του οργανισμού.

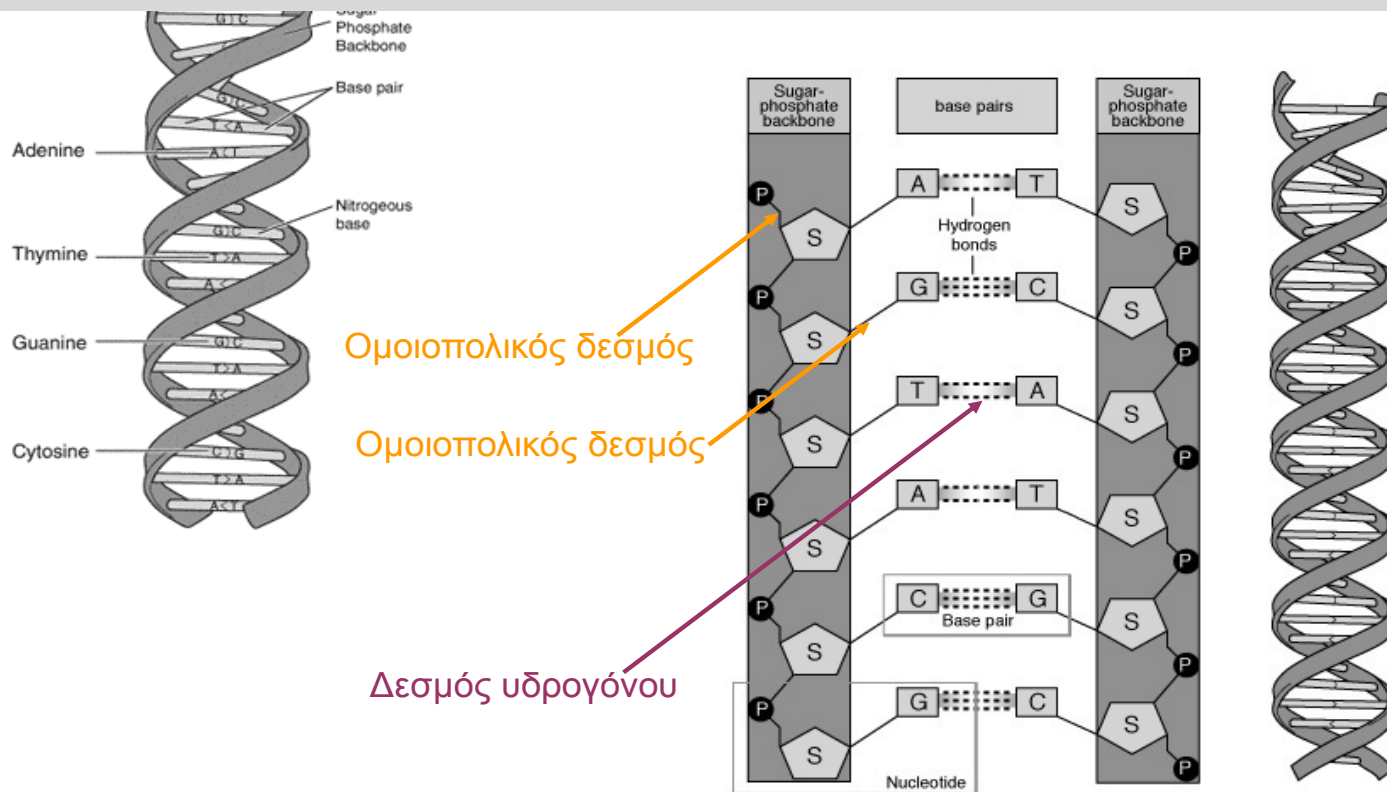
Campbell Biology, 5η έκδοση, σελ. 255



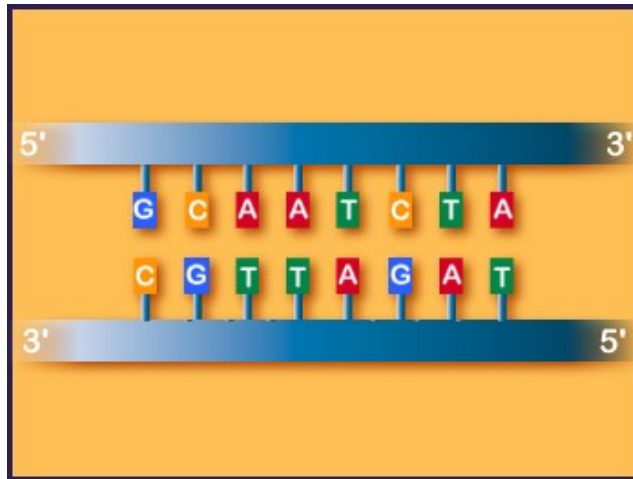
# Διπλή έλικα του DNA (1/4)

- **Διπλή έλικα του DNA:** Σχηματίζονται δεσμοί υδρογόνου μεταξύ A-T και C-G.

(<http://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/thumb/b/b8/DNA-structure-and-bases.png/180px-DNA-structure-and-bases.png>)

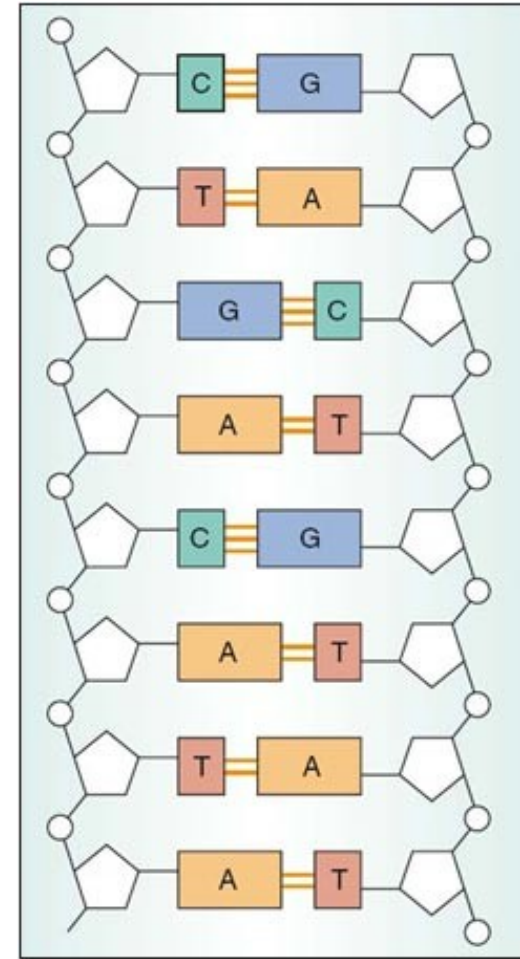


# Διπλή έλικα του DNA (2/4)

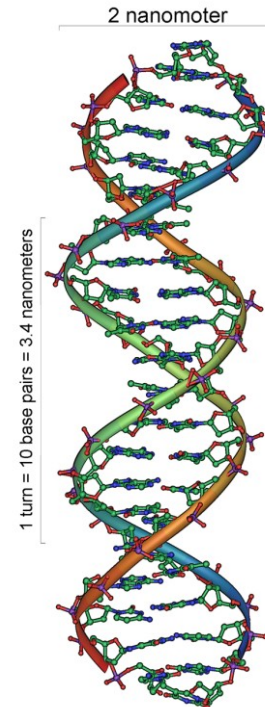
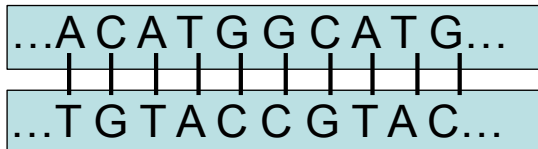


Αλληλουχία DNA: 5'-G G C T A T G C G A-3'

Συμπληρωματική: 3'-C C G A T A C G C T-5'



# Διπλή έλικα του DNA (3/4)



- Το μήκος μιας αλυσίδας DNA εκφράζεται σε ζεύγη βάσεων ( $1.5 \times 10^7 - 6 \times 10^9$  **base pairs**, bp)
- Το μήκος του ανθρώπινου DNA είναι  $3 \times 10^9$  bp
- Το μήκος ενός ζεύγους βάσεων είναι  $0.34 \times 10^{-9}$  m

Επομένως το μήκος του ανθρώπινου DNA είναι:

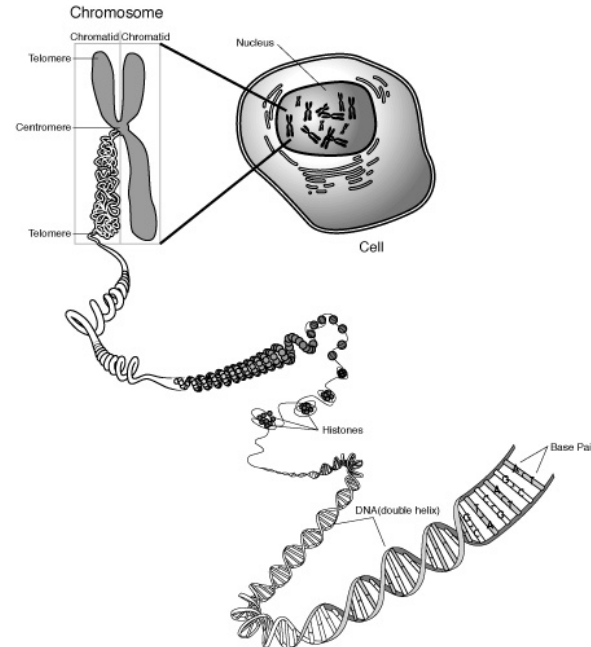
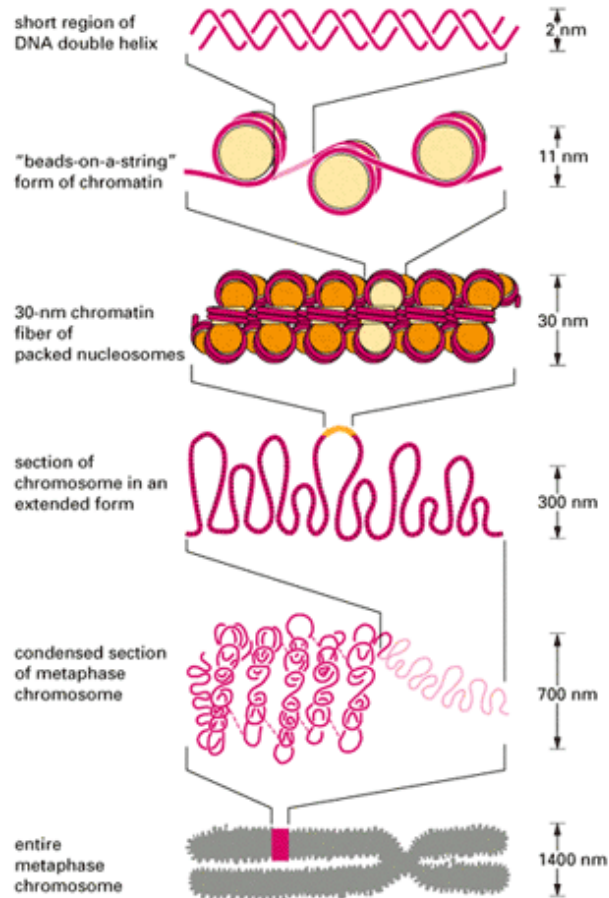
$$(\text{μήκος ζεύγους βάσης}) \times (\text{αριθμός βάσεων ανά κύτταρο}) \times (\text{αριθμός κυττάρων ανθρώπινου σώματος})$$
$$(0.34 \times 10^{-9} \text{m}) \quad \times \quad (3 \times 10^9) \quad \times \quad (10^{13}) \quad = \quad 1.0 \times 10^{13} \text{m}$$

Η απόσταση Γης-Ήλιου είναι  $1.5 \times 10^{11}$  !!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!!





# Διπλή έλικα του DNA (4/4)



<http://www.accessexcellence.org/AB/GG/chromosome.html>

- Πηγές εικόνων:

[http://library.thinkquest.org/C004535/media/chromosome\\_packing.gif](http://library.thinkquest.org/C004535/media/chromosome_packing.gif)

<http://www.xenophilia.com/news/dna.jpg>



# Καρυότυπος σωματικών κυττάρων

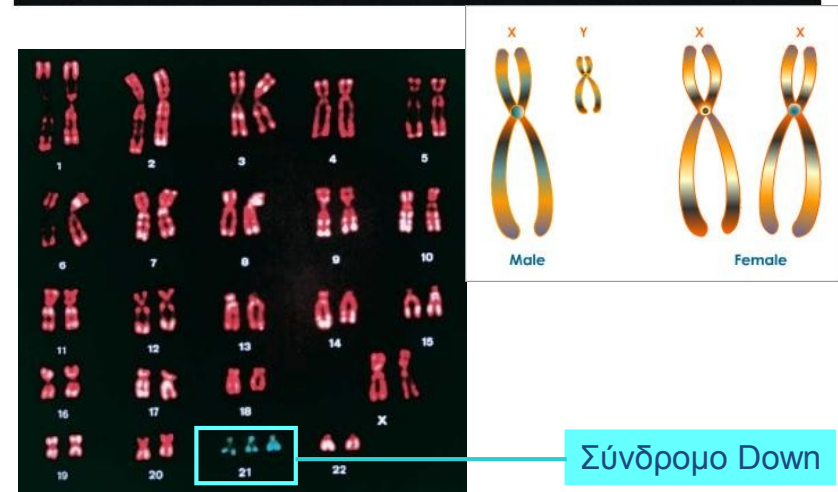
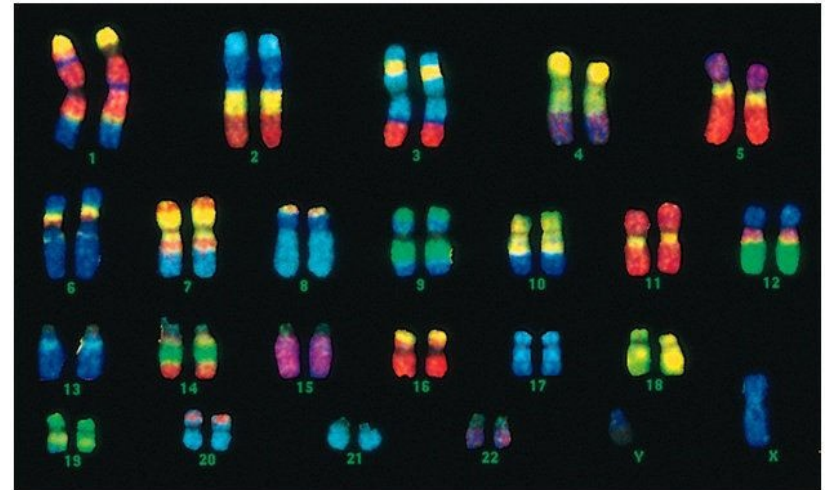
- **Ορισμός:** το σύνολο των χρωματοσωμάτων ενός σωματικού κυττάρου, τοποθετημένα ανάλογα με το μέγεθός τους και πάντοτε σε ζεύγη ομολόγων.
- Κάθε ανθρώπινο κύτταρο έχει 46 χρωμοσώματα – 2 από κάθε είδος.
- 23 χρωμοσώματα από κάθε γονέα.

Πηγές εικόνων:

<http://magnesianews.gr/wp-content/uploads/2015/02/dna.jpg>

<http://www.healthgiants.com/wp-content/uploads/2011/01/Genetic-Disorders-150x150.jpg>

<http://images.tutorvista.com/cms/images/123/human-sex-chromosomes.jpeg>



# Ορισμένα γεγονότα

---

- Το DNA διαφέρει ανάμεσα σε ανθρώπους κατά 0.2% (1 βάση σε κάθε 500).
- Το ανθρώπινο DNA είναι κατά 98% πανομοιότυπο με αυτό των χιμπατζήδων.
- Το 98% του DNA στο ανθρώπινο γονιδίωμα έχει άγνωστη λειτουργία (junk DNA).
- Λιγότερο από το 2% του ανθρώπινου DNA αποτελεί να γνωστά γονίδια, τα οποία καθορίζουν τα χαρακτηριστικά του είδους στο σύνολό του αλλά και τα χαρακτηριστικά των επιμέρους οργανισμών που ανήκουν στο είδος αυτό.



# Ένα γονίδιο είναι DNA

---

- Ένα γονίδιο περιλαμβάνει το μήκος μιας DNA αλληλουχίας, η οποία είναι απαραίτητη για τη σύνθεση μιας πρωτεΐνης.
- Τα ανθρώπινα γονίδια περιέχουν περιοχές που κωδικοποιούνται (εξώνια) και περιοχές που δεν κωδικοποιούνται (εσώνια).
- Μόνο το 2% του ανθρώπινου DNA κωδικοποιείται σε πρωτεΐνες. Η λειτουργία του υπόλοιπου 98% παραμένει άγνωστη (junk DNA!!!!)



# Human Genome Project

---

- **Παγκόσμια προσπάθεια** χαρτογράφησης του ανθρώπινου DNA.
- Το project άρχισε το 1990 και ολοκληρώθηκε το 2003 (2 χρόνια νωρίτερα από τον αρχικό σχεδιασμό).
- **Στόχος:**
  - να αναγνωριστούν τα 20,000-25,000 περίπου γονίδια του ανθρώπινου DNA,
  - να τοποθετηθεί όλη η πληροφορία σε βάσεις δεδομένων και να βελτιωθούν τα εργαλεία για την ανάλυσή της.
- **Δυσκολίες:**
  - Μικρά γονίδια είναι δύσκολο να αναγνωριστούν.
  - Από ένα γονίδιο μπορεί να προκύπτουν πολλές πρωτεΐνες.
  - Μερικά γονίδια κωδικοποιούν μόνο RNA.
  - Δύο γονίδια μπορεί να υπερκαλύπτονται.



---

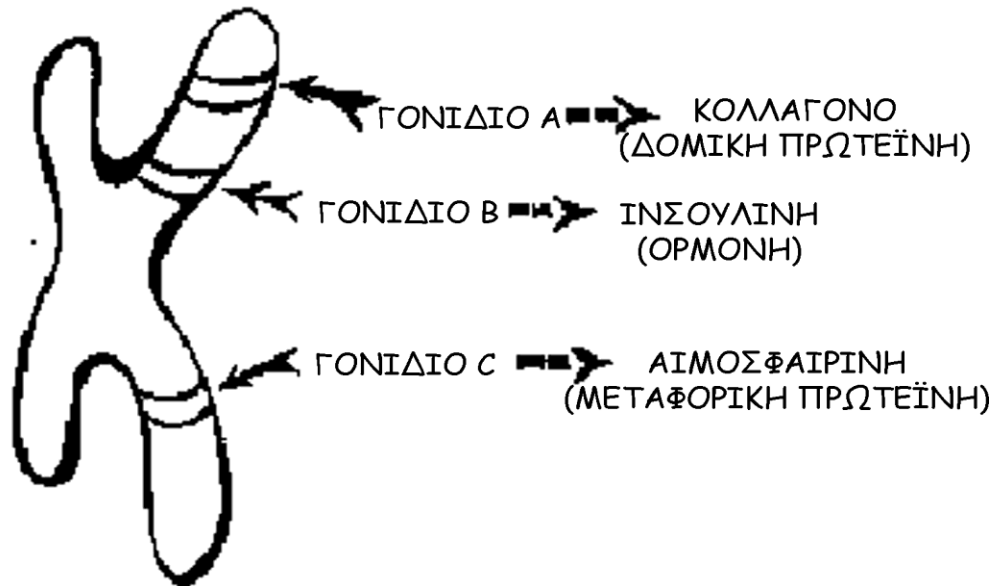
# Από το DNA στις πρωτεΐνες



# Τα γονίδια παράγουν πρωτεΐνες

- γονιδίωμα -> γονίδια -> πρωτεΐνες (σχηματίζει κυτταρικά, δομικά & ζωτικά λειτουργικά) -> μονοπάτια & φυσιολογία.

ΤΑ ΓΟΝΙΔΙΑ ΑΠΟΘΗΚΕΥΟΥΝ  
ΠΛΗΡΟΦΟΡΙΕΣ ΓΙΑ ΝΑ ΦΤΙΑΞΟΥΝ ΠΡΩΤΕΪΝΕΣ





# Χημική σύσταση των κυττάρων

---

- 70% του κυττάρου είναι νερό.
- Εκτός από το νερό, όλα σχεδόν τα μόρια ενός κυττάρου βασίζονται στον άνθρακα.
  - Τα κύτταρα περιέχουν τέσσερις κύριες οικογένειες μικρών **οργανικών** μορίων.
- **Σάκχαρα (υδατάνθρακες):** Πηγές ενέργειας για τα κύτταρα και δομικά στοιχεία για τους πολυσακχαρίτες. Γενικός μοριακός τύπος:  $(CH_2O)_n$ , όπου  $n=3, 4, 5, 6$  ή  $7$ . π.χ. Γλυκόζη.
- **Λιπαρά οξέα:** Είναι τα συστατικά των λιπιδίων και των κυτταρικών μεμβρανών.
- **Νουκλεϊνικά οξέα:** DNA και RNA. Αποθηκεύουν και ανακαλούν βιολογικές πληροφορίες.
- **Αμινοξέα:** Δομικά στοιχεία των **πρωτεϊνών**. 20 διαφορετικά αμινοξέα δημιουργούν τις πρωτεΐνες.



# Πρωτεΐνες: Οι «δουλευταράδες» του κύτταρου

---

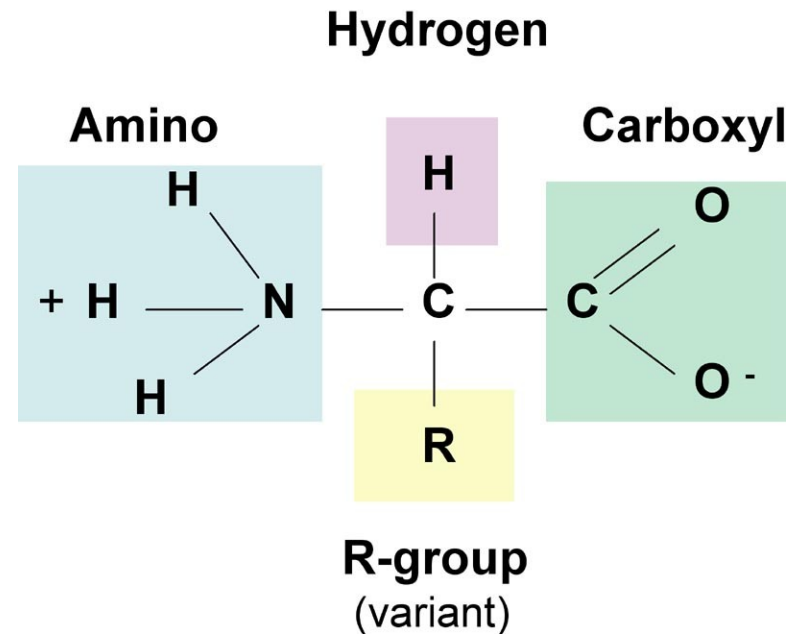
- 20 διαφορετικά **αμινοξέα**:
  - Οι διαφορετικές χημικές ιδιότητες αναγκάζουν τις πρωτεϊνικές αλυσίδες (chains) να αναδιπλωθούν σε συγκεκριμένες τριδιάστατες δομές που ορίζουν τις ιδιαίτερες λειτουργίες τους στο κύτταρο.
- Οι πρωτεΐνες εκτελούν όλες τις **απαραίτητες εργασίες** για το κύτταρο:
  - Κατασκευάζουν κυτταρικές δομές.
  - Εκτελούν την πέψη των θρεπτικών ουσιών.
  - Εκτελούν μεταβολικές λειτουργίες.
  - Ελέγχουν τη ροή των πληροφοριών μέσα στο κύτταρο και μεταξύ των κυτταρικών «κοινοτήτων».
- Οι πρωτεΐνες συνεργάζονται με άλλες πρωτεΐνες ή νουκλειϊ(νι)κά οξέα ως «μοριακές μηχανές»:
  - Δομές που ενώνονται και λειτουργούν με πολύ συγκεκριμένους-τρόπους (όπως κλειδί-κλειδαριά).



# Αμινοξέα – Amino acids

- Ομάδα μορίων με μεγάλη ποικιλία.
- Όλα τα μέλη περιέχουν:
  - Ένα άτομο α-άνθρακα.
  - Μια όξινη καρβοξυλική ομάδα.
  - Μια αμινομάδα.
  - Πλευρική αλυσίδα, R-group.
- Η χημική ποικιλία προκύπτει από την πλευρική αλυσίδα που επίσης συνδέεται με τον α-άνθρακα.
- **ΠΡΩΤΕΪΝΕΣ:** Πολυμερή αμινοξέων, τα οποία συνδέονται το ένα με το άλλο σε μία μακριά αλυσίδα, η οποία κατόπιν διπλώνεται σε μία τρισδιάστατη δομή, μοναδική για κάθε είδος πρωτεΐνης.

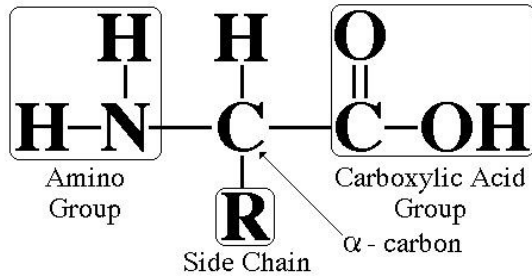
## Amino Acid Structure



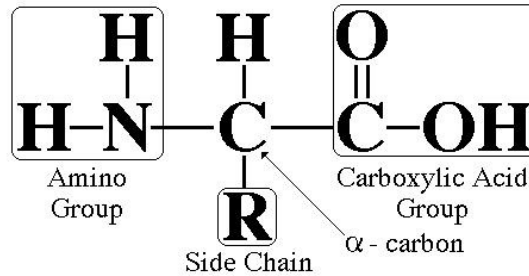
# Δομή πρωτεΐνης

# Δομή νουκλεοτιδίων - DNA

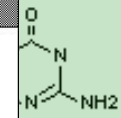
## Amino Acid Structure



## Amino Acid Structure

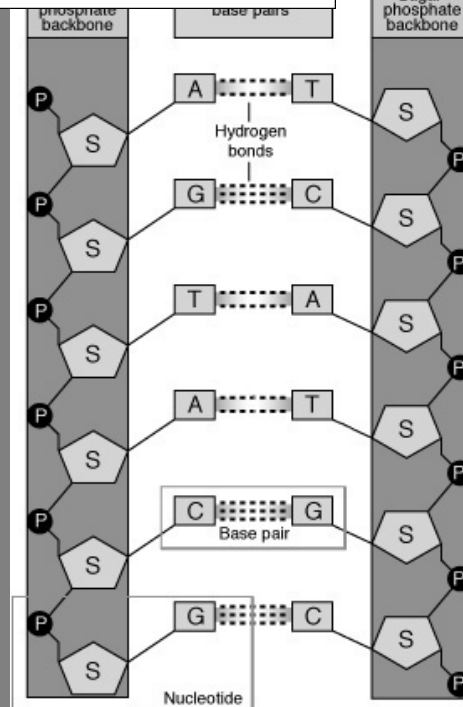
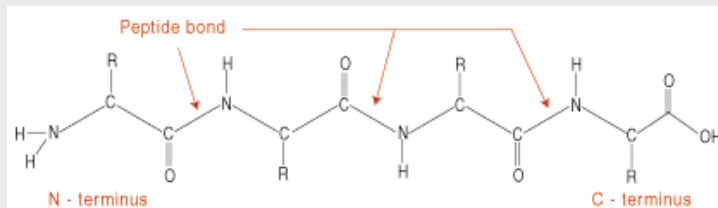
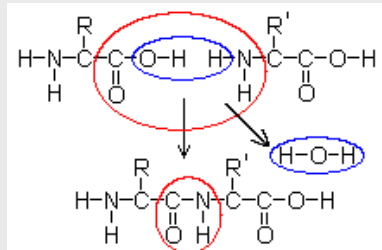


phosphate



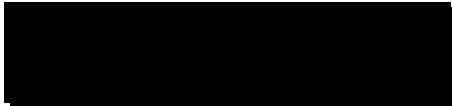
deoxyribose  
or ribose  
sugar

- **Πεπτιδικός δεσμός:** Ο ομοιοπολικός δεσμός ανάμεσα σε δύο γειτονικά αμινοξέα.
- **Πολυπεπτίδιο:** Αλυσίδα αμινοξέων





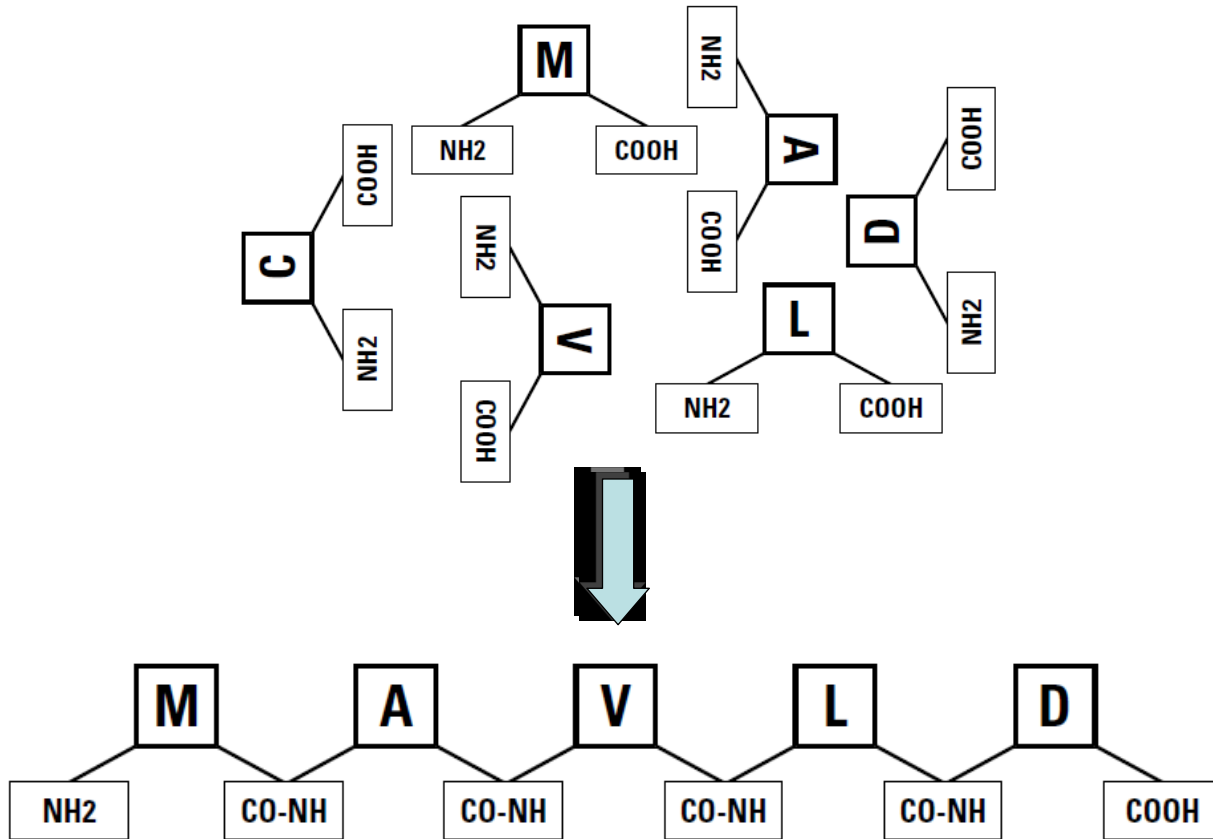
# 20 διαφορετικά αμινοξέα



	NONPOLAR, HYDROPHOBIC	R GROUPS	POLAR, UNCHARGED	
Alanine Ala A MW = 89	$\begin{matrix} ^- \text{OOC} \\   \\ \text{H}_3\text{N}^+ - \text{CH} - \text{CH}_3 \end{matrix}$		$\begin{matrix} \text{H} - \text{CH} - \text{COO}^- \\   \\ \text{N H}_3^+ \end{matrix}$	Glycine Gly G MW = 75
Valine Val V MW = 117	$\begin{matrix} ^- \text{OOC} \\   \\ \text{H}_3\text{N}^+ - \text{CH} - \text{CH}(\text{CH}_3)_2 \end{matrix}$		$\begin{matrix} \text{HO} - \text{CH}_2 - \text{CH} - \text{COO}^- \\   \\ \text{N H}_3^+ \end{matrix}$	Serine Ser S MW = 105
Leucine Leu L MW = 131	$\begin{matrix} ^- \text{OOC} \\   \\ \text{H}_3\text{N}^+ - \text{CH} - \text{CH}_2 - \text{CH}(\text{CH}_3)_2 \end{matrix}$		$\begin{matrix} \text{OH} \\   \\ \text{CH}_3 - \text{CH} - \text{CH} - \text{COO}^- \\   \\ \text{N H}_3^+ \end{matrix}$	Threonine Thr T MW = 119
Isoleucine Ile I MW = 131	$\begin{matrix} ^- \text{OOC} \\   \\ \text{H}_3\text{N}^+ - \text{CH} - \text{CH}(\text{CH}_3) - \text{CH}_2 - \text{CH}_3 \end{matrix}$		$\begin{matrix} \text{HS} - \text{CH}_2 - \text{CH} - \text{COO}^- \\   \\ \text{N H}_3^+ \end{matrix}$	Cysteine Cys C MW = 121
Phenylalanine Phe F MW = 131	$\begin{matrix} ^- \text{OOC} \\   \\ \text{H}_3\text{N}^+ - \text{CH} - \text{CH}_2 - \text{C}_6\text{H}_5 \end{matrix}$		$\begin{matrix} \text{HO} - \text{C}_6\text{H}_4 - \text{CH}_2 - \text{CH} - \text{COO}^- \\   \\ \text{N H}_3^+ \end{matrix}$	Tyrosine Tyr Y MW = 181
Tryptophan Trp W MW = 204	$\begin{matrix} ^- \text{OOC} \\   \\ \text{H}_3\text{N}^+ - \text{CH} - \text{CH}_2 - \text{C}_8\text{H}_6\text{N}_2 \end{matrix}$		$\begin{matrix} \text{NH}_2 \\   \\ \text{O} = \text{C} - \text{CH}_2 - \text{CH} - \text{COO}^- \\   \\ \text{N H}_3^+ \end{matrix}$	Asparagine Asn N MW = 132
Methionine Met M MW = 149	$\begin{matrix} ^- \text{OOC} \\   \\ \text{H}_3\text{N}^+ - \text{CH} - \text{CH}_2 - \text{CH}_2 - \text{S} - \text{CH}_3 \end{matrix}$		$\begin{matrix} \text{NH}_2 \\   \\ \text{O} = \text{C} - \text{CH}_2 - \text{CH}_2 - \text{CH} - \text{COO}^- \\   \\ \text{N H}_3^+ \end{matrix}$	Glutamine Gln Q MW = 146
Proline Pro P MW = 115	$\begin{matrix} ^- \text{OOC} \\   \\ \text{CH} - \text{CH}_2 - \text{CH}_2 \\   \quad \quad   \\ \text{HN} - \text{CH}_2 \end{matrix}$		<b>POLAR BASIC</b> $\begin{matrix} \text{NH}_3^+ - \text{CH}_2 - (\text{CH}_2)_3 - \text{CH} - \text{COO}^- \\   \\ \text{N H}_3^+ \end{matrix}$	Lysine Lys K MW = 146
Aspartic acid Asp D MW = 133	<b>POLAR ACIDIC</b> $\begin{matrix} ^- \text{OOC} \\   \\ \text{H}_3\text{N}^+ - \text{CH} - \text{CH}_2 - \text{C}(=\text{O})\text{O}^- \end{matrix}$		$\begin{matrix} \text{NH}_2 \\   \\ \text{N H}_2^+ = \text{C} - \text{NH} - (\text{CH}_2)_3 - \text{CH} - \text{COO}^- \\   \\ \text{N H}_3^+ \end{matrix}$	Arginine Arg R MW = 174
Glutamine acid Glu E MW = 147	$\begin{matrix} ^- \text{OOC} \\   \\ \text{H}_3\text{N}^+ - \text{CH} - \text{CH}_2 - \text{CH}_2 - \text{C}(=\text{O})\text{O}^- \end{matrix}$		$\begin{matrix} \text{HN} = \text{NH} \\   \\ \text{C} - \text{CH}_2 - \text{CH} - \text{COO}^- \\   \\ \text{N H}_3^+ \end{matrix}$	Histidine His H MW = 155



# MAVLD





# Example: Insulin

---

Sequence of insulin:

MALWMRLLPLLALLALWGPDPAAAFVNQHLCGSHLVEA  
LYLVCGGERGFFYTPKTRREAEDLQVGGQVELGGGPGAGS  
LQPLALEGSLQKRGIVEQCCTSICSLYQLENYCN



# ΣΥΝΟΠΤΙΚΑ...

AMINO ACID		SIDE CHAIN	
Aspartic acid	Asp	D	negative
Glutamic acid	Glu	E	negative
Arginine	Arg	R	positive
Lysine	Lys	K	positive
Histidine	His	H	positive
Asparagine	Asn	N	uncharged polar
Glutamine	Gln	Q	uncharged polar
Serine	Ser	S	uncharged polar
Threonine	Thr	T	uncharged polar
Tyrosine	Tyr	Y	uncharged polar

———— POLAR AMINO ACIDS ————

AMINO ACID		SIDE CHAIN	
Alanine	Ala	A	nonpolar
Glycine	Gly	G	nonpolar
Valine	Val	V	nonpolar
Leucine	Leu	L	nonpolar
Isoleucine	Ile	I	nonpolar
Proline	Pro	P	nonpolar
Phenylalanine	Phe	F	nonpolar
Methionine	Met	M	nonpolar
Tryptophan	Trp	W	nonpolar
Cysteine	Cys	C	nonpolar

———— NONPOLAR AMINO ACIDS ————



# Κι ένα παράδοξο...

---

20 αμινοξέα:

- **Πρωτεΐνη 2 αμινοξέων.** Πόσοι πιθανοί συνδυασμοί προκύπτουν;
- $20^2 = 400$  πιθανοί συνδυασμοί.
- **Πρωτεΐνη 5 αμινοξέων.** Πόσοι πιθανοί συνδυασμοί προκύπτουν;
- $20^5 = 3,200,000$  πιθανοί συνδυασμοί.
- Οι περισσότερες πρωτεΐνες έχουν μήκος **300 αμινοξέα.**
- $20^{300} = 10^{40}$
- **Όμως στον άνθρωπο έχουν αναγνωριστεί περίπου 100,000 πρωτεΐνες.**



# Δομή πρωτεϊνών

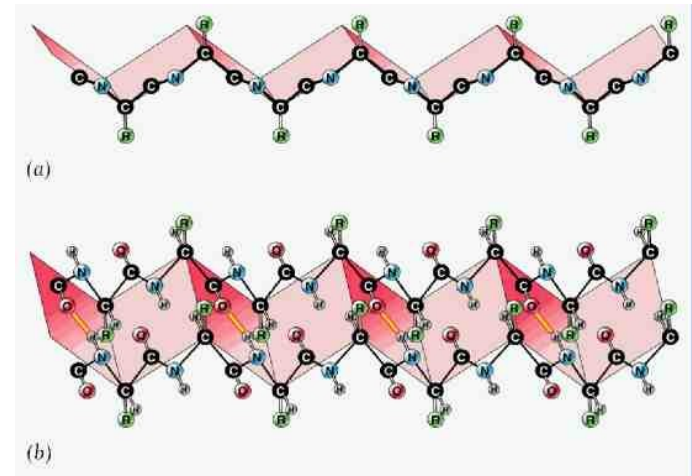
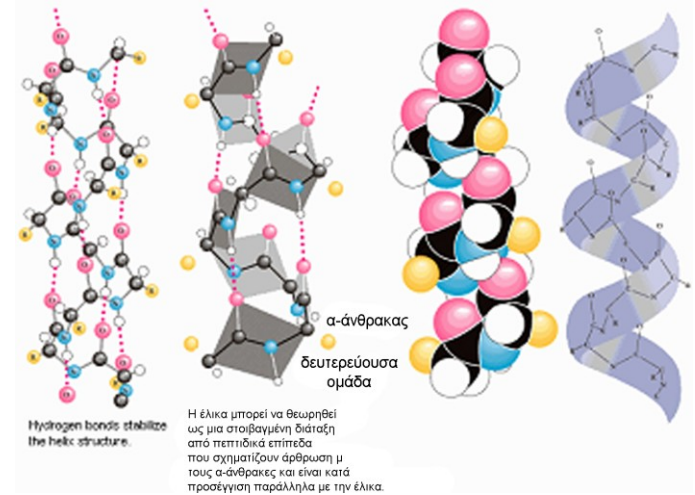
---

- Κρίσιμη για τη σταθερότητα και λειτουργία τους.



# Αναδίπλωση πρωτεϊνών

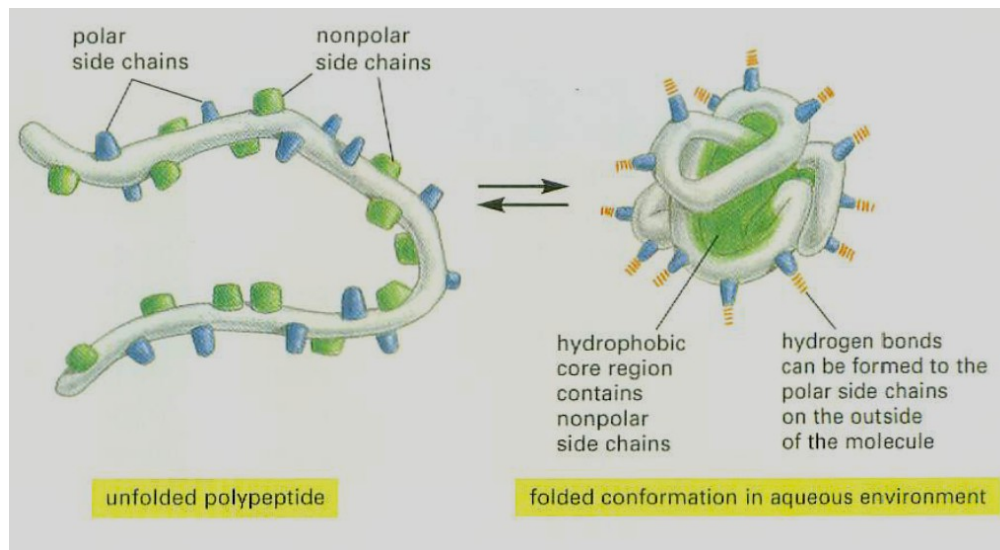
- Οι πρωτεΐνες τείνουν να αναδιπλώνονται στη δομή με τη χαμηλότερη ελεύθερη ενέργεια.
- Οι πρωτεΐνες αρχίζουν να αναδιπλώνονται πριν ολοκληρωθεί η μετάφραση του πεπτιδίου.
- Οι πρωτεΐνες «θάβουν» τα περισσότερα από τα υδρόφοβα κατάλοιπά τους σε ένα εσωτερικό κέντρο ώστε να σχηματίσουν μια έλικα.
- Οι περισσότερες πρωτεΐνες παίρνουν τη μορφή δευτερευουσών δομών, α έλικας και β πτυχωτής επιφάνειας.



# Δίπλωμα ή πτύχωση (folding) πρωτεϊνών

- Οι πρωτεΐνες πτυχώνονται στη διαμόρφωση (conformation) με τη χαμηλότερη ενέργεια.
- Η συνολική διαμόρφωση μιας πρωτεΐνης είναι μοναδική.

(πηγή εικόνας: [http://i2.wp.com/classconnection.s3.amazonaws.com/804/flashcards/1343804/png/screen\\_shot\\_2012-04-22\\_at\\_41109\\_pm1335136282642.png](http://i2.wp.com/classconnection.s3.amazonaws.com/804/flashcards/1343804/png/screen_shot_2012-04-22_at_41109_pm1335136282642.png))

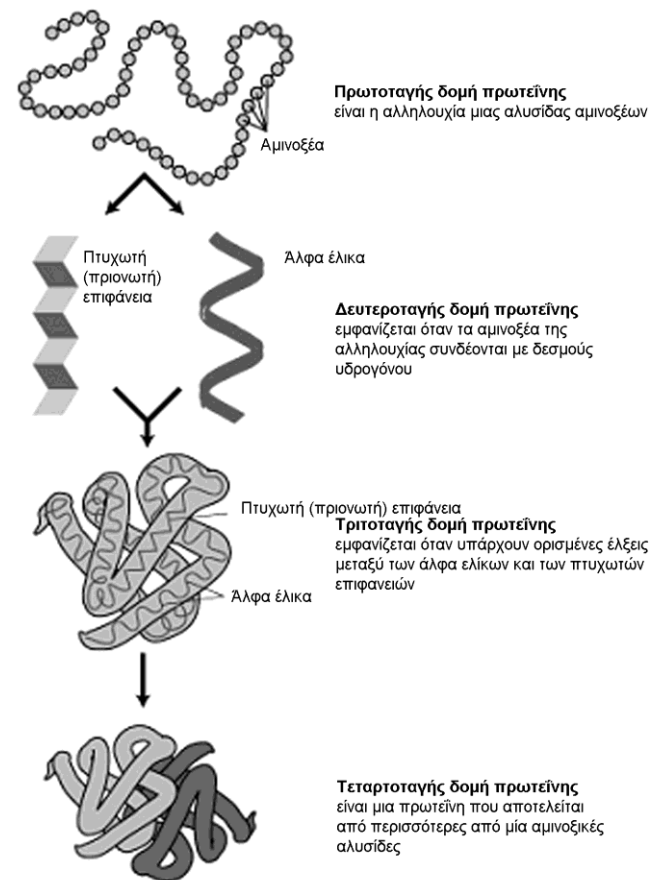




# Αναδίπλωση πρωτεϊνών (συνέχεια)

- Η δομή που επιλέγει μια πρωτεΐνη είναι ζωτική για τη χημεία της.
- Η δομή της προσδιορίζει ποια από τα αμινοξέα της είναι «εκτεθειμένα» και εκτελούν τη λειτουργία της.
- Επίσης, η δομή της καθορίζει με ποια υποστρώματα μπορεί να αντιδράσει.

Πηγή εικόνας: <http://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/a/a6/Protein-structure.png>

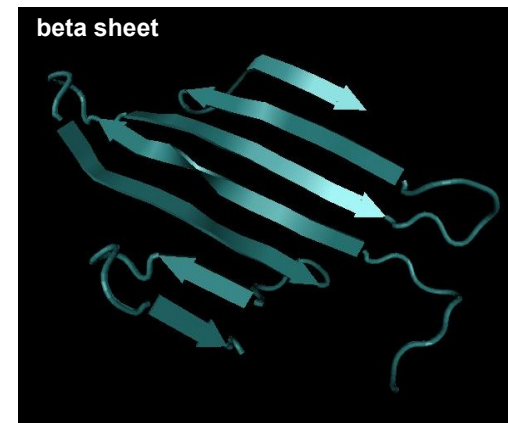
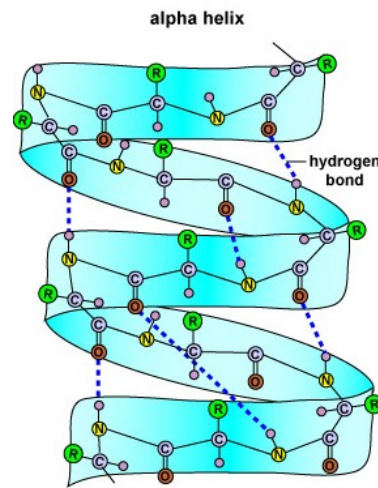
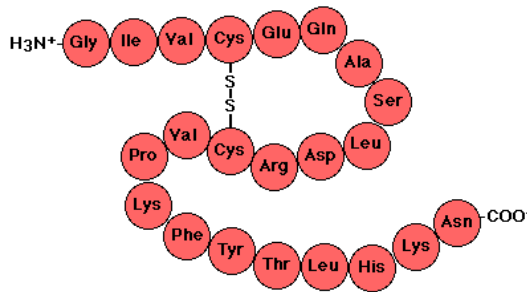




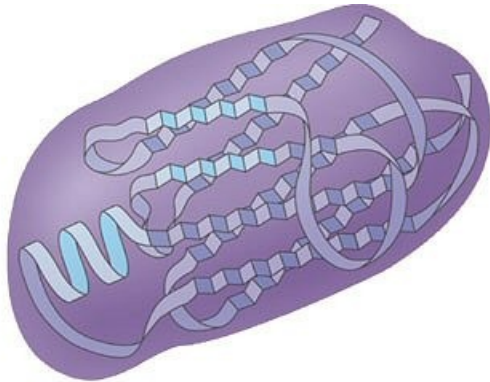
# Επίπεδα οργάνωσης των πρωτεϊνών (1/2)

- **Πρωτοταγής δομή (Primary structure):** Η αλληλουχία των αμινοξέων μιας πρωτεΐνης.
- **Δευτεροταγής δομή (Secondary structure):** Οι α-έλικες και τα β-πτυχωτά φύλλα που σχηματίζονται από τμήματα της πολυπεπτιδικής αλυσίδας.

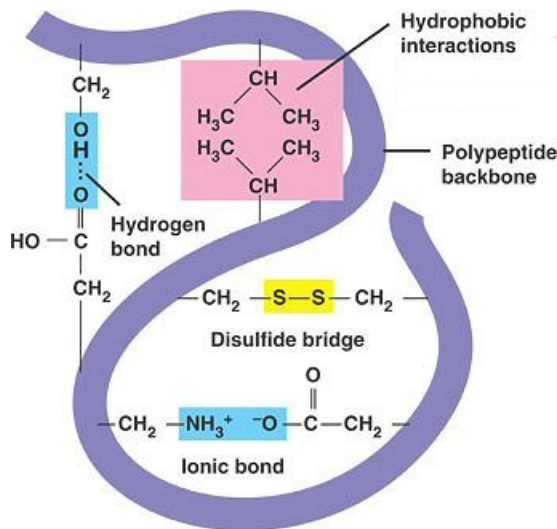
Πηγές εικόνων: [http:// commons.wikimedia.org/wiki/File:StrukturaSekondare.jpg](http://commons.wikimedia.org/wiki/File:StrukturaSekondare.jpg)  
[http:// fai.unne.edu.ar/biologia/macromoleculas/figacro/primary.gif](http://fai.unne.edu.ar/biologia/macromoleculas/figacro/primary.gif)



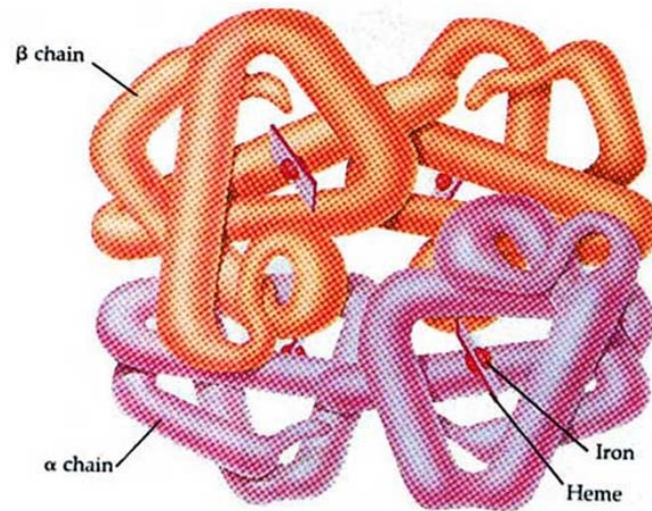
# Επίπεδα οργάνωσης των πρωτεϊνών (2/2)



- **Τριτοταγής δομή (Tertiary structure):** Η τρισδιάστατη διαμόρφωση μιας πολυπεπτιδικής αλυσίδας.
- **Τεταρτοταγής δομή (Quaternary structure):** Η πλήρης δομή που αποτελείται από σύμπλοκο δύο ή περισσότερων πολυπεπτιδίων.



(a) Collagen



(b) Hemoglobin



# Οι πρωτεΐνες με αριθμούς... (1/2)

---

- Συνήθως το μέγεθος των πρωτεϊνών κυμαίνεται από 30 έως 10,000 αμινοξέα.
- Στη μεγάλη πλειονότητά τους, οι πρωτεΐνες έχουν μήκος 50-2000 αμινοξέα.
- Το μέσο μοριακό βάρος ενός αμινοξέος είναι 110.
- Το μέσο μοριακό βάρος μιας πρωτεΐνης είναι 5,000-220,000.
- Εκφράζουμε τη μάζα μιας πρωτεΐνης σε Daltons.
- 1 dalton = 1 μονάδα ατομικής μάζας.
- **Παράδειγμα:** Μία πρωτεΐνης με μοριακό βάρος 50,000 έχει μάζα 50,000 dalton ή 50kDa.



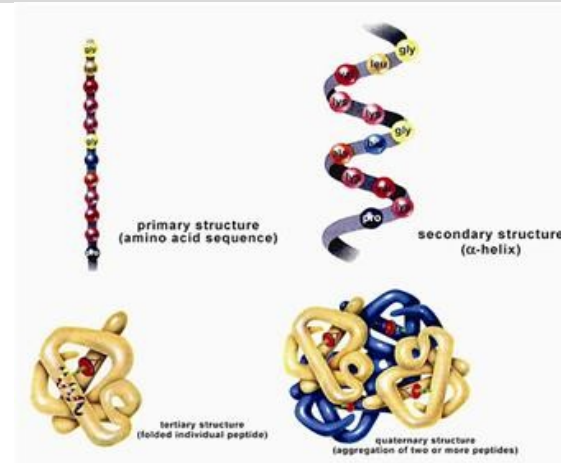
# Οι πρωτεΐνες με αριθμούς... (2/2)

- Για μία συνήθη πρωτεΐνη των 300 αμινοξέων υπάρχουν  $20^{300}$  διαφορετικές πολυπεπτιδικές αλυσίδες.
- Πολύ λίγες από αυτές μπορούν να αποκτήσουν σταθερή τρισδιάστατη δομή.
- Μεγαλύτερη πρωτεΐνη: Titin, 34,350 αμινοξέα.
- Μικρότερη πρωτεΐνη:
  - Chignolin, 10 αμινοξέα.
  - Ubiquitin, 76 αμινοξέα.

## Ubiquitin

76 αμινοξέα x 110 = 8360 MW

8360 daltons = 8.36kDa



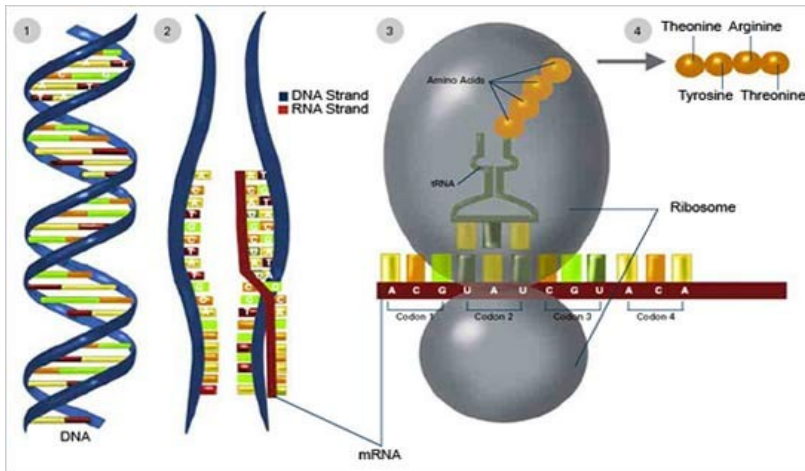
# Γενετικό υλικό (DNA-RNA)

---

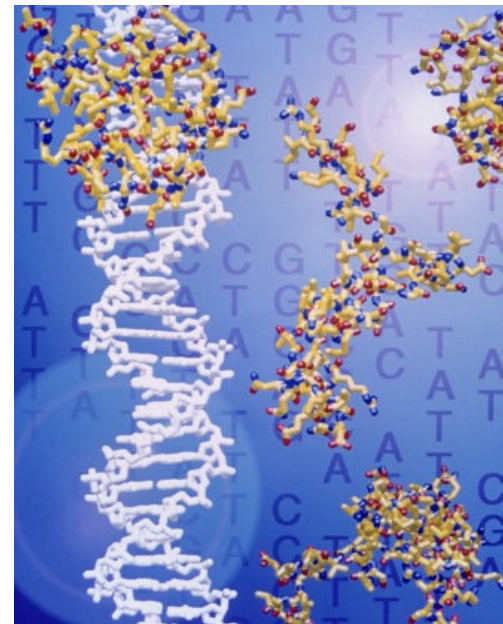
- Τι σχέση έχει το γενετικό υλικό (DNA-RNA) με τις πρωτεΐνες;
- Πώς προκύπτει μία πρωτεΐνη από το DNA;



# Από το DNA στις πρωτεΐνες



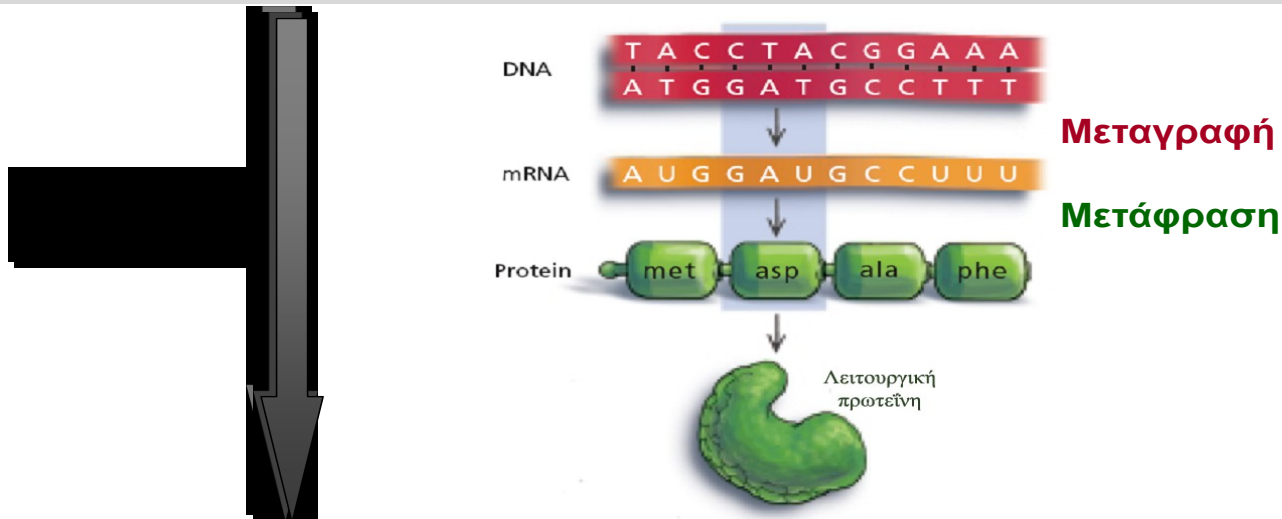
- Ποιο στοιχείο μεταφέρει πληροφορίες ανάμεσα στο DNA και τις πρωτεΐνες;





# Γενετικές οδηγίες

- Οι γενετικές οδηγίες που μεταφέρονται από το DNA καθορίζουν την αλληλουχία των αμινοξέων των πρωτεϊνών.
- Κάθε φορά που το κύτταρο χρειάζεται μία συγκεκριμένη πρωτεΐνη:
  - Μια κατάλληλη περιοχή νουκλεοτιδίων (DNA) αντιγράφεται σε ένα άλλο είδος νουκλεϊνικού οξέος, το RNA.
  - Τα RNA αντίγραφα αποτελούν εκμαγείο για τη σύνθεση πρωτεϊνών.



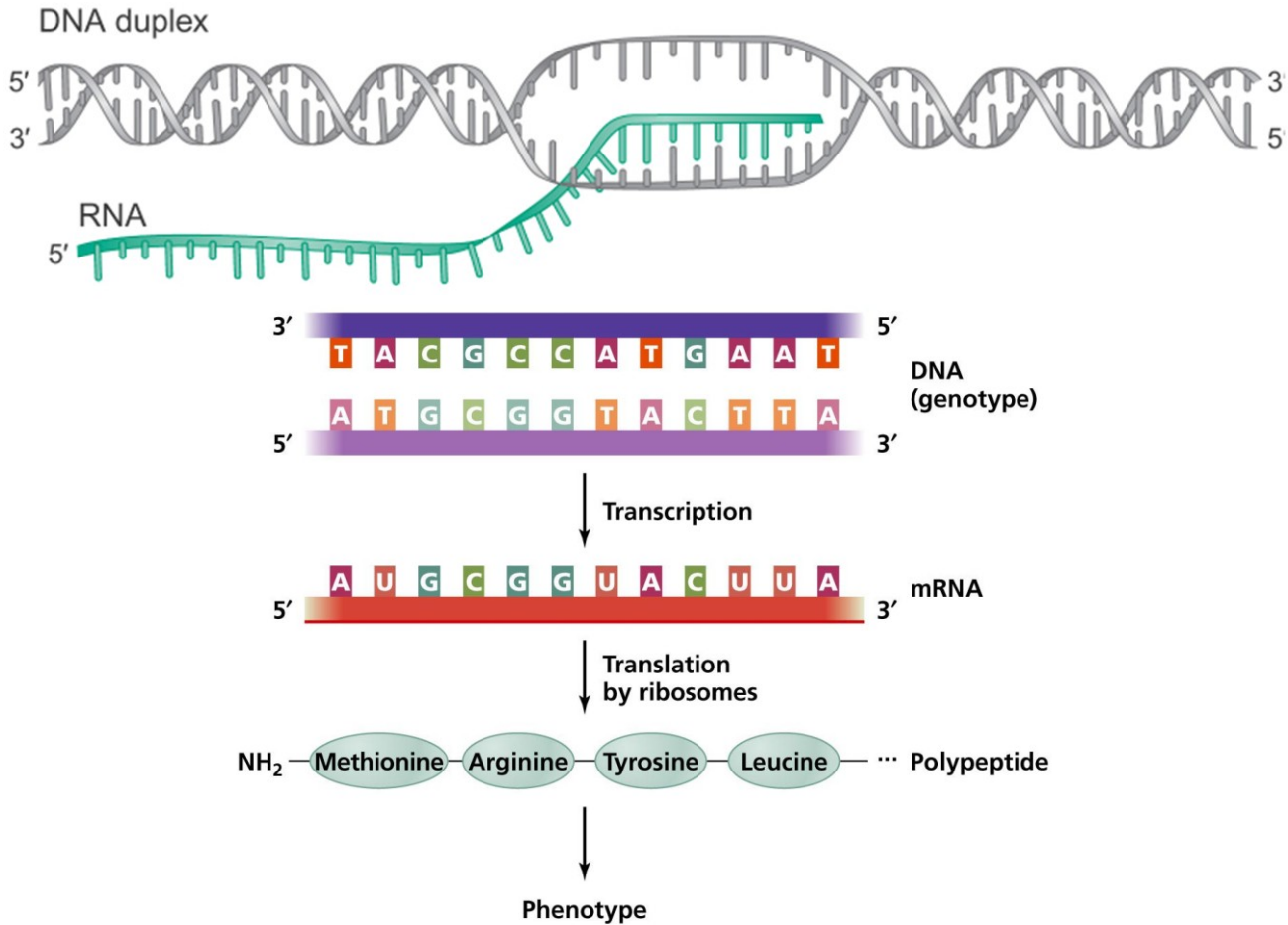


# Μεταγραφή: Τμήματα του DNA μεταγράφονται σε RNA

- **RNA:** Γραμμικό πολυμερές που αποτελείται από 4 διαφορετικά νουκλεοτίδια. Οι βάσεις των νουκλεοτιδίων είναι:
  - Αδενίνη – Adenine (A).
  - Γουανίνη – Guanine (G).
  - Κυτοσίνη – Cytosine (C).
  - Ουρακίλη – Uracile (U).



# DNA duplex



Copyright © 2006 Pearson Education, Inc., publishing as Benjamin Cummings.



# Μετάφραση: Το mRNA μεταφράζεται σε πρωτεΐνη (1/2)

- Το RNA μικραίνει κατά πολύ και εξέρχεται του πυρήνα.
- Στο κυτταρόπλασμα μεταφράζεται σε πρωτεΐνη με βάση το γενετικό κώδικα.
- 4 νουκλεοτίδια (A, U, G, C) οργανώνονται σε τριπλέτες. Πιθανοί συνδυασμοί:  $4^3$ .
- 61 τριπλέτες κωδικοποιούν τα 20 αμινοξέα / 3 μηνύματα τερματισμού.
- Ένα αμινοξύ κωδικοποιείται από διαφορετικές τριπλέτες / κωδικόνια.

		Second base				
		U	C	A	G	
First base	U	UUU } Phenyl- UUC } alanine (phe) UUA } Leucine (leu) UUG }	UCU } UCC } Serine (ser) UCA } UCG }	UAU } Tyrosine (tyr) UAC } UAA } Stop codon UAG } Stop codon	UGU } Cysteine (cys) UGC } UGA } Stop codon UGG } Tryptophan (trp)	U C A G
	C	CUU } CUC } Leucine (leu) CUA } CUG }	CCU } CCC } Proline (pro) CCA } CCG }	CAU } Histidine (his) CAC } CAA } Glutamine (glu) CAG }	CGU } CGC } Arginine (arg) CGA } CGG }	U C A G
	A	AUU } Isoleucine (ile) AUC } AUA } Methionine (met) AUG } Start codon	ACU } ACC } Threonine (thr) ACA } ACG }	AAU } Asparagine (asn) AAC } AAA } Lysine (lys) AAG }	AGU } Serine (ser) AGC } AGA } Arginine (arg) AGG }	U C A G
	G	GUU } GUC } Valine (val) GUA } GUG }	GCU } GCC } Alanine (ala) GCA } GCG }	GAU } Aspartic acid (asp) GAC } GAA } Glutamic acid (glu) GAG }	GGU } GGC } Glycine (gly) GGA } GGG }	U C A G

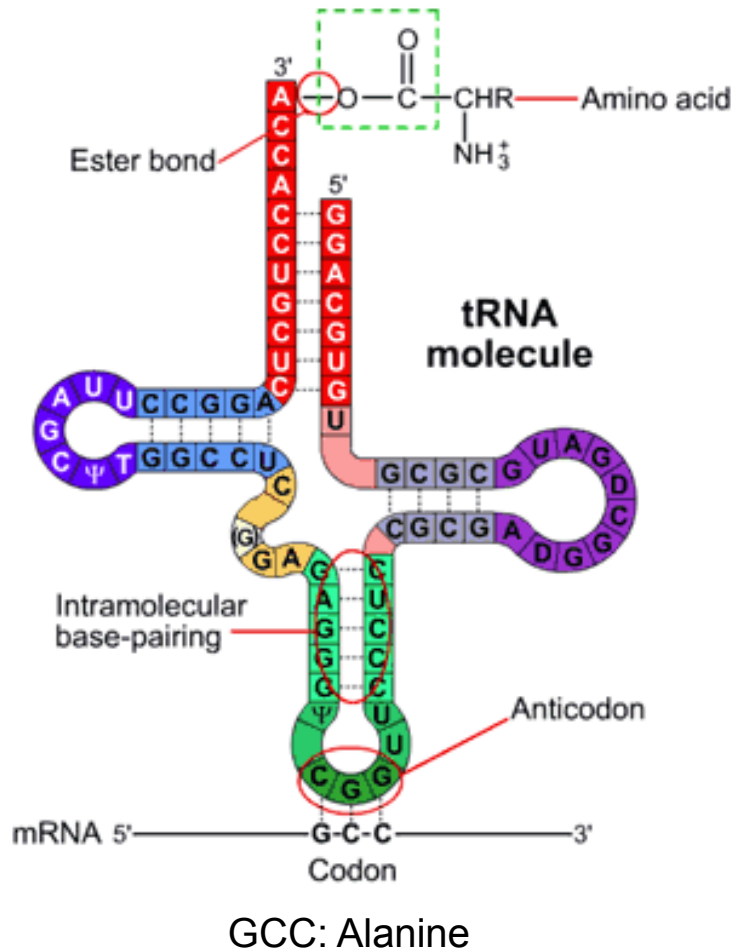


# Μετάφραση: Το mRNA μεταφράζεται σε πρωτεΐνη (2/2)

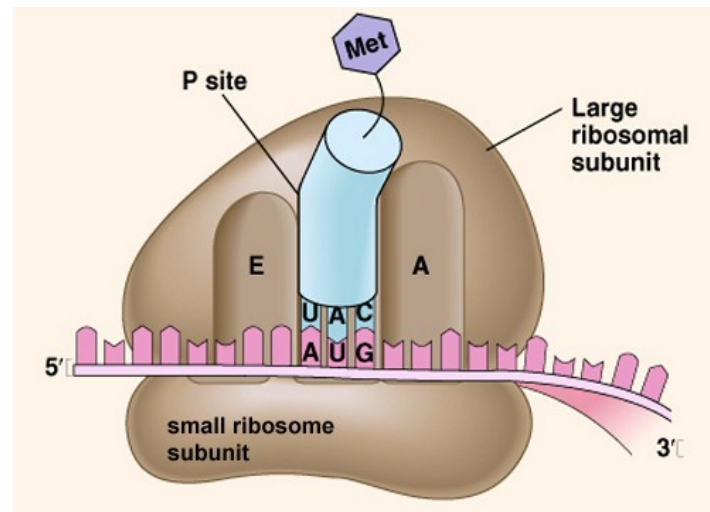
<b>Ala/A</b>	GCU, GCC, GCA, GCG	<b>Leu/L</b>	UUA, UUG, CUU, CUC, CUA, CUG
<b>Arg/R</b>	CGU, CGC, CGA, CGG, AGA, AGG	<b>Lys/K</b>	AAA, AAG
<b>Asn/N</b>	AAU, AAC	<b>Met/M</b>	AUG
<b>Asp/D</b>	GAU, GAC	<b>Phe/F</b>	UUU, UUC
<b>Cys/C</b>	UGU, UGC	<b>Pro/P</b>	CCU, CCC, CCA, CCG
<b>Gln/Q</b>	CAA, CAG	<b>Ser/S</b>	UCU, UCC, UCA, UCG, AGU, AGC
<b>Glu/E</b>	GAA, GAG	<b>Thr/T</b>	ACU, ACC, ACA, ACG
<b>Gly/G</b>	GGU, GGC, GGA, GGG	<b>Trp/W</b>	UGG
<b>His/H</b>	CAU, CAC	<b>Tyr/Y</b>	UAU, UAC
<b>Ile/I</b>	AUU, AUC, AUA	<b>Val/V</b>	GUU, GUC, GUA, GUG
<b>START</b>	AUG	<b>STOP</b>	UAA, UGA, UAG



# Ο κεντρικός ρόλος του μεταφορικού RNA (transfer RNA, tRNA) (1/3)



- **Μεταφορικό RNA:** Συνδέεται τόσο με το κωδικόνιο (τριπλέτα, mRNA) όσο και με το αμινοξύ.
- **Αντικωδικόνιο:** Συμπληρωματικό του κωδικονίου του mRNA.
- Η διαδικασία της μετάφρασης πραγματοποιείται στο ριβοσωμάτιο.



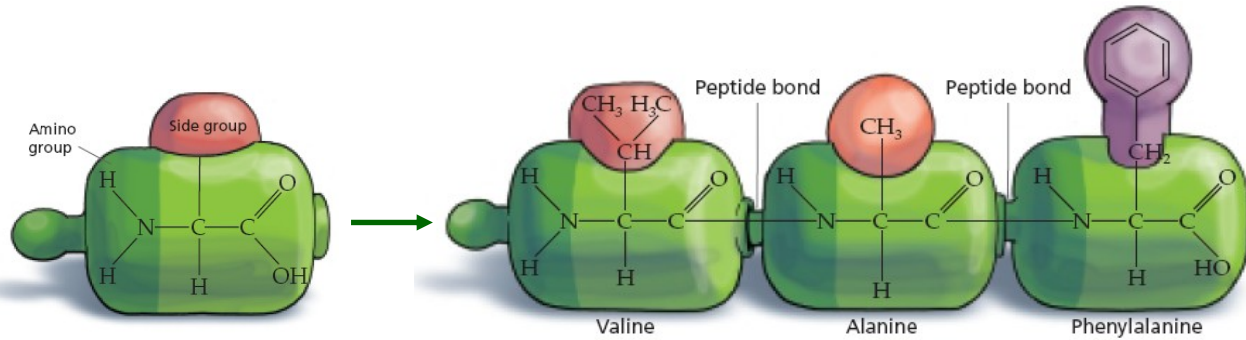
# Ο κεντρικός ρόλος του μεταφορικού RNA (transfer RNA, tRNA) (2/3)

---

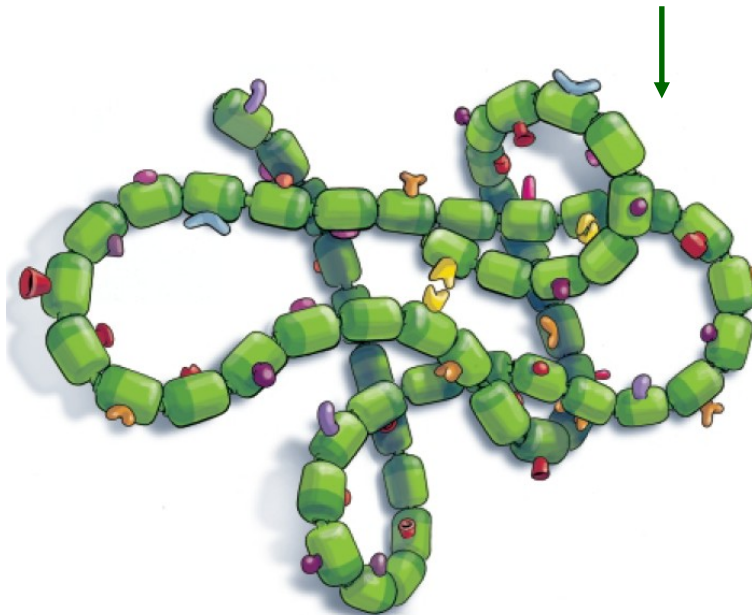
1. Τα μεταφορικά RNA (transfer RNA – tRNA) και τα αμινοξέα βρίσκονται ελεύθερα στο κυτταρόπλασμα.
2. Κάθε tRNA συνδέεται με ένα συγκεκριμένο αμινοξύ.
3. Το tRNA θα λιμνάσει αν το συμπληρωματικό RNA βρίσκεται στο ριβόσωμα.
4. Το ριβόσωμα μεταφέρεται στην επόμενη τριπλέτα για να συνδέσει το επόμενο tRNA.
5. Η αλυσίδα των αμινοξέων παίρνει την τελική δομή και η πρωτεΐνη είναι πλέον λειτουργική.



# Ο κεντρικός ρόλος του μεταφορικού RNA (transfer RNA, tRNA) (3/3)

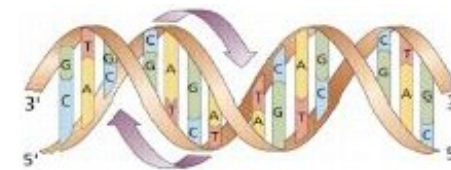
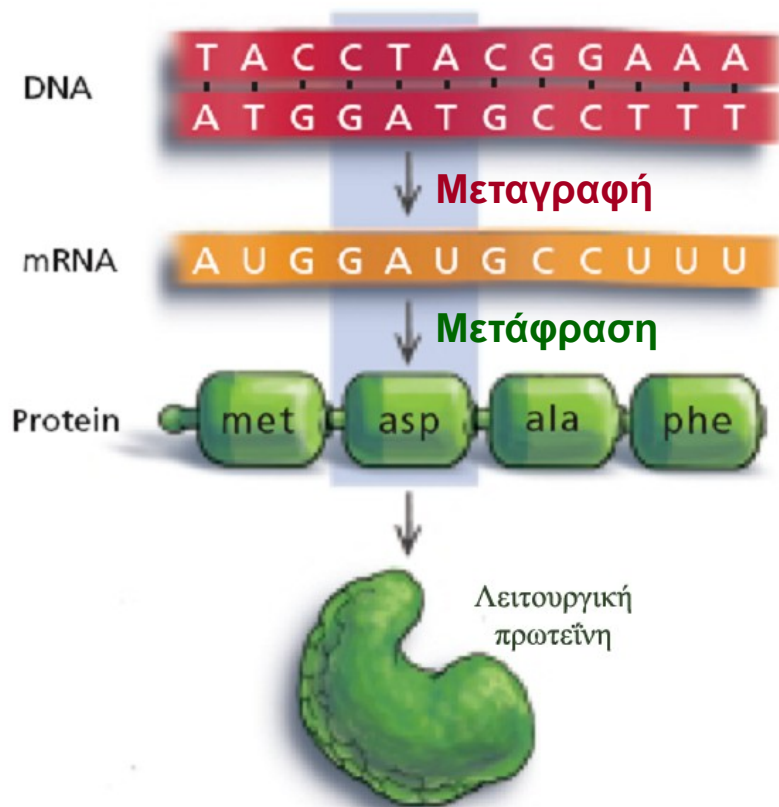


Έχει υπολογιστεί ότι ένα τυπικό ανθρώπινο κύτταρο συνθέτει περίπου 100000 διαφορετικές πρωτεΐνες κατά τη διάρκεια του κύκλου του (15-20 ώρες)



# Έκφραση γονιδίων

## - Κεντρικό Δόγμα Βιολογίας (1/2)



Ένα αμινοξύ κωδικοποιείται από τρεις διαδοχικές βάσεις DNA (τριπλέτα)





# Έκφραση γονιδίων

## - Κεντρικό Δόγμα Βιολογίας (2/2)

### 1. Read the DNA sequence:

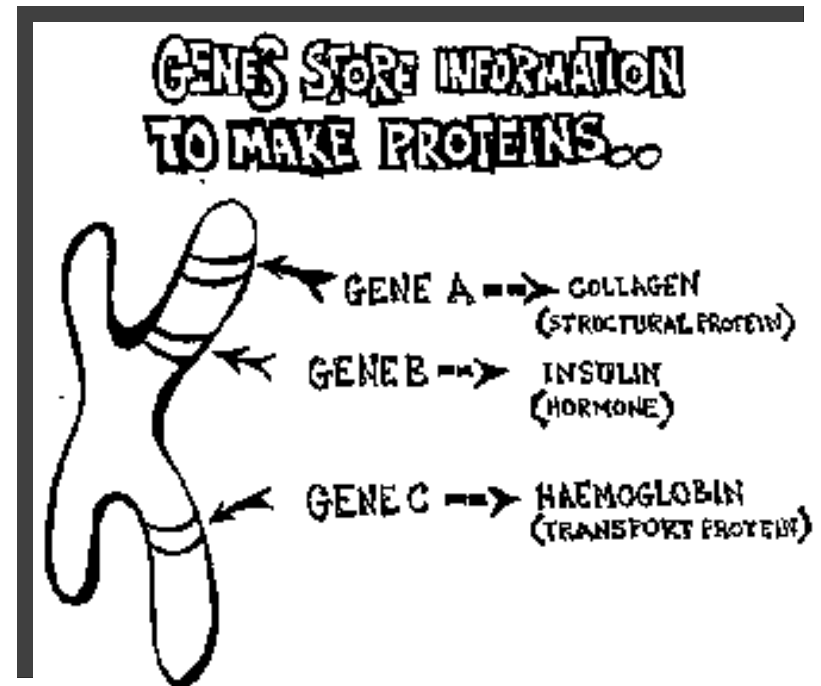
ATGGAAGTATTTAAAGCGC  
CACCTATTGGGATATAAG

### 2. Decompose it into successive triplets:

ATG GAA GTA TTT AAA  
GCG CCA CCT ATT GGG  
ATA TAA G .

### 3. Translate each triplet into the corresponding amino acid:

M E V F K A P P I G I STOP



# Πιο απλά...

---

- **DNA-RNA:** Ακολουθία συμβόλων (συμβολοσειρά-string) από ένα αλφάβητο τεσσάρων χαρακτήρων / γραμμάτων: A, C, T, G (DNA) or A, C, U, G (RNA).
- **Πρωτεΐνη:** Ακολουθία συμβόλων (συμβολοσειρά-string) από ένα αλφάβητο είκοσι χαρακτήρων / γραμμάτων, των 20 αμινοξέων.



# Η αρχή και το τέλος μιας πρωτεΐνης

---

- **Κωδικόνιο έναρξης (start codon):**
  - Μεθειονίνη - Methionine (Met, M) AUG ή ATG
- **Κωδικόνια τερματισμού (stop codon):**
  - Δεν προκύπτει αμινοξύ.
  - UAA ή TAA
  - UAG ή TAG
  - UGA ή TGA
- **Κωδικοποιούσα αλληλουχία (coding sequence, CDS):**
  - Αρχίζει με ATG και τελειώνει με ένα κωδικόνιο τερματισμού. Από τη μετάφρασή του προκύπτει μία πρωτεΐνη.



# Βασικοί ορισμοί – Συνοψίζοντας (1/2)

---

- Το γονιδίωμα (**genome**) ενός οργανισμού είναι ένα πλήρες σετ DNA:
  - Τα βακτήρια έχουν περίπου 600,000 ζεύγη βάσεων DNA.
  - Ο άνθρωπος και το ποντίκι έχουν περίπου 3 εκατ. ζεύγη βάσεων DNA.
- Το ανθρώπινο γονιδίωμα έχει 24 χρωμοσώματα:
  - Κάθε χρωμόσωμα περιέχει πολλά γονίδια.
- **Γονίδιο (Gene):**
  - Βασική φυσική και λειτουργική μονάδα της κληρονομικότητας.
  - Συγκεκριμένες αλληλουχίες DNA κωδικοποιούν (φτιάχνουν) πρωτεΐνες.
- **Πρωτεΐνες (Proteins):**
  - Δημιουργούν τη δομή του κυττάρου.
  - Μεγάλα, πολύπλοκα μόρια τα οποία αποτελούνται από δομικά στοιχεία που ονομάζονται αμινοξέα (**amino acids**).



# Βασικοί ορισμοί – Συνοψίζοντας (2/2)

---

- **a.a.:** Amino acids = Αμινοξέα (Πρωτεΐνη).
- **bp:** Base pairs = Ζεύγη βάσεων, νουκλεοτιδίων (DNA).
- **mRNA:** messenger RNA, αλληλουχία νουκλεοτιδίων, η θυμίνη (T) έχει αντικατασταθεί από ουρακίλη (U).
- **Partial, fragment:** Μέρος της αλληλουχίας (πρωτεΐνη ή DNA).
- **Gene:** Γονίδιο, κομμάτι DNA από το οποίο προκύπτει μία πρωτεΐνη.
- **Start codon:** ATG. Κωδικοποιεί τη μεθειονίνη.
- **Stop codon:** TAA (UAA), TAG (UAG), TGA (UGA). Δεν κωδικοποιεί αμινοξύ.
- **CDS:** Coding sequence, Κωδικοποιούσα αλληλουχία, Γονίδιο. Αρχίζει με ATG και τελειώνει με ένα κωδικόνιο τερματισμού.



# Suggested videos...

---

- <http://www.youtube.com/watch?v=983lhh20rGY>
- <http://www.youtube.com/watch?v=E8NHcQesYl8>



# Γιατί χρειάζεται η βιοπληροφορική;

---

- Η βιοπληροφορική είναι ο συνδυασμός της βιολογίας και της πληροφορικής.
- Οι **τεχνολογίες προσδιορισμού αλληλουχίας του DNA** έχουν δημιουργήσει **τεράστιες ποσότητες πληροφορίας**, οι οποίες μπορούν να αναλυθούν αποτελεσματικά μόνο με υπολογιστές.
- Μέχρι τώρα, έχει προσδιοριστεί η αλληλουχία για 70 είδη
  - Ο άνθρωπος, ο αρουραίος, ο χιμπατζής, η κότα, και πολλά άλλα.
- Καθώς αυξάνεται υπερβολικά ο όγκος και η πολυπλοκότητα των πληροφοριών, χρειάζονται περισσότερα υπολογιστικά εργαλεία για την ταξινόμηση των δεδομένων.
  - Η βιοπληροφορική έρχεται να σώσει την κατάσταση!!!





# Βιο-πληροφορίες

---

- Από τη στιγμή που ανακαλύψαμε τον τρόπο που το DNA λειτουργεί ως «εγχειρίδιο οδηγιών» της ζωής, η **βιολογία έχει γίνει επιστήμη των πληροφοριών**.
- Τώρα που έχουμε προσδιορίσει την αλληλουχία πολλών διαφορετικών οργανισμών, είμαστε σε θέση να βρούμε το νόημα του DNA μέσω της **συγκριτικής γονιδιωματικής**, κατά τρόπο παρόμοιο με τη συγκριτική γλωσσολογία.
- Σιγά-σιγά, μαθαίνουμε το «συντακτικό» του DNA.



# Από τη δομή στη λειτουργία

---

- Η οργανική χημεία μας δείχνει ότι η δομή των μορίων προσδιορίζει τις δυνατές αντιδράσεις τους.
- Μία μέθοδος μελέτης των πρωτεϊνών είναι να συμπεράνουμε τη λειτουργία τους με βάση τη δομή τους, ειδικά για τις ενεργές θέσεις.



# Δύο σύντομες εφαρμογές της βιοπληροφορικής

---

- BLAST (Basic Local Alignment Search Tool, Βασικό εργαλείο αναζήτησης τοπικών στοιχίσεων).
- PROSITE (PROtein SITEs and patterns database, Βάση δεδομένων για μοτίβα και θέσεις πρωτεϊνών).



# BLAST

---

- Ένα υπολογιστικό εργαλείο που μας επιτρέπει να συγκρίνουμε δεδομένες αλληλουχίες με τις καταχωρίσεις στις τρέχουσες βιολογικές βάσεις δεδομένων.
- Ένα εξαιρετικό εργαλείο για την πρόβλεψη των λειτουργιών μιας αλληλουχίας που βασίζεται σε ομοιότητες στοίχισης με γνωστά γονίδια.



# Βιολογικές βάσεις δεδομένων

---

- Άπειρα βιολογικά δεδομένα και δεδομένα αλληλουχιών είναι διαθέσιμα δωρεάν μέσω των ηλεκτρονικών βάσεων δεδομένων.
- Υπολογιστικοί αλγόριθμοι χρησιμοποιούνται για την αποδοτική αποθήκευση τεράστιων ποσοτήτων βιολογικών δεδομένων.

Παραδείγματα:

- NCBI GeneBank: <http://ncbi.nih.gov>
  - Τεράστια συλλογή βάσεων δεδομένων, από τις οποίες ξεχωρίζει η βάση δεδομένων με αλληλουχίες νουκλεοτιδίων.
- Protein Data Bank <http://www.pdb.org>
  - Βάση δεδομένων με τριτοταγείς δομές πρωτεϊνών.
- SWISSPROT <http://www.expasy.org/sprot/>
  - Βάση δεδομένων με σχολιασμένες αλληλουχίες πρωτεϊνών.
- PROSITE <http://kr.expasy.org/prosite>
  - Βάση δεδομένων με μοτίβα ενεργών θέσεων πρωτεϊνών.



# Βάση δεδομένων PROSITE

---

- Βάση δεδομένων με ενεργές θέσεις πρωτεϊνών.
- Ένα εξαιρετικό εργαλείο που προβλέπει την ύπαρξη ενεργών θέσεων σε μια άγνωστη πρωτεΐνη με βάση μια πρωτοταγή αλληλουχία.



# Μοντελοποίηση

---

- Η μοντελοποίηση βιολογικών διεργασιών μας δείχνει αν κατανοούμε μια δεδομένη διεργασία.
- Λόγω του μεγάλου πλήθους μεταβλητών που υπάρχουν στα βιολογικά προβλήματα, χρειαζόμαστε πανίσχυρους υπολογιστές για να αναλύσουμε ορισμένα βιολογικά ερωτήματα.





# Μοντελοποίηση πρωτεϊνών

---

- Οι αλγόριθμοι απεικόνισης ενεργών θέσεων της κβαντικής χημείας μας επιτρέπουν να δούμε τους πιθανούς μηχανισμούς αντίδρασης και δημιουργίας δεσμών.
- Η ομόλογη μοντελοποίηση πρωτεϊνών (homologous protein modeling) είναι μια συγκριτική πρωτεϊνωματική μέθοδος με την οποία προσδιορίζεται η τριτοταγής δομή μιας άγνωστης πρωτεΐνης.
- Οι αλγόριθμοι πρόβλεψης τριτοταγούς αναδίπλωσης απέχουν πολύ από το ιδανικό, αλλά μπορούμε να προβλέψουμε τη δευτεροταγή δομή με ακρίβεια ~80%.
  - Τα ηλεκτρονικά εργαλεία πρόβλεψης με τη μεγαλύτερη ακρίβεια:
    - PSIPred.
    - PHD.



# Μοντελοποίηση της βιολογίας των συστημάτων

---

- Προβλέψεις των αλληλεπιδράσεων ολόκληρων κυττάρων.
  - Διεργασίες οργανιδίων, μοντελοποίηση επιπέδων έκφρασης.
- Είναι σήμερα εφικτή για συγκεκριμένες διεργασίες (π.χ., μεταβολισμός στο βακτήριο *E. coli*, απλά κύτταρα).  
Ανάλυση ισορροπίας ροής (flux balance analysis).



# Το μέλλον...

---

- Η βιοπληροφορική βρίσκεται ακόμα σε νηπιακή ηλικία.
- Έχουμε να μάθουμε ακόμα πολλά σχετικά με το πώς οι πρωτεΐνες μπορούν να χειρίζονται μια αλληλουχία ζευγών βάσεων με τόσο συγκεκριμένο τρόπο, το οποίο έχει σαν αποτέλεσμα έναν πλήρως λειτουργικό οργανισμό.
- Επομένως, πώς μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε αυτές τις πληροφορίες προς όφελος της ανθρωπότητας, χωρίς να τις καταχραστούμε;



# Πηγές


---

- Daniel Sam, “Greedy Algorithm”, παρουσίαση.
- Glenn Tesler, “Genome Rearrangements in Mammalian Evolution: Lessons from Human and Mouse Genomes”, παρουσίαση.
- Ernst Mayr, “What evolution is”.
- Neil C. Jones, Pavel A. Pevzner, “Εισαγωγή στους αλγορίθμους βιοπληροφορικής”.
- Alberts, Bruce, Alexander Johnson, Julian Lewis, Martin Raff, Keith Roberts, Peter Walter. Molecular Biology of the Cell. New York: Garland Science. 2002.
- Mount, Ellis, Barbara A. List. Milestones in Science & Technology. Phoenix: The Oryx Press. 1994.
- Voet, Donald, Judith Voet, Charlotte Pratt. Fundamentals of Biochemistry. New Jersey: John Wiley & Sons, Inc. 2002.
- Campbell, Neil. Biology, 3η έκδοση. The Benjamin/Cummings Publishing Company, Inc., 1993.
- Snustad, Peter και Simmons, Michael. Principles of Genetics. John Wiley & Sons, Inc, 2003.



# Open e-class

Χρήστης: Bellou Sofia, Έξοδος



Χαρτοφυλάκιο χρήστη » Βιοπληροφορική » Γλωσσάριο


**Επιλογές Μαθήματος**

- Ανακοινώσεις
- Ασκήσεις
- Ατζέντα
- Γλωσσάριο**
- Έγγραφα
- Εργασίες
- Πληροφορίες Μαθήματος
- Πολυμέσα
- Σύνδεσμοι

## Βιοπληροφορική

Γλωσσάριο

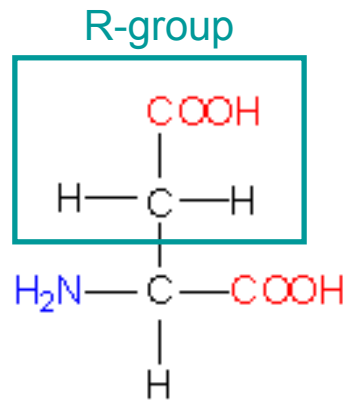
Όρος	Ορισμός
<b>C-terminal</b>	<i>The end of the protein with the free COOH</i>
<b>Codon</b>	<i>The sequence of 3 nucleotides in DNA/RNA that encodes for a specific amino acid</i>
<b>Gene</b>	<i>Specific sequences of DNA bases that encode instructions on how to make proteins.</i>
<b>Genome</b>	<i>Is an organism's complete set of DNA</i>
<b>mRNA (messenger RNA)</b>	<i>A ribonucleic acid whose sequence is complementary to that of a protein-coding gene in DNA</i>
<b>N-terminal</b>	<i>The end of the protein with the free NH<sub>2</sub></i>
<b>Proteins</b>	<i>Large, complex molecules made up of smaller subunits called amino acids</i>

 Πληροφορίες Πνευματικών Δικαιωμάτων POWERED BY  
OPEN eCLASS

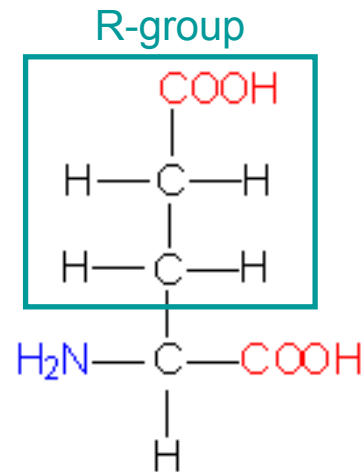


# Οικογένειες αμινοξέων (1/4)

1. Όξινα – Έχουν αρνητικό φορτίο
2. Βασικά – Έχουν θετικό φορτίο
3. Πολικά, μη φορτισμένα - Υδρόφιλα
4. Μη πολικά - Υδρόφοβα



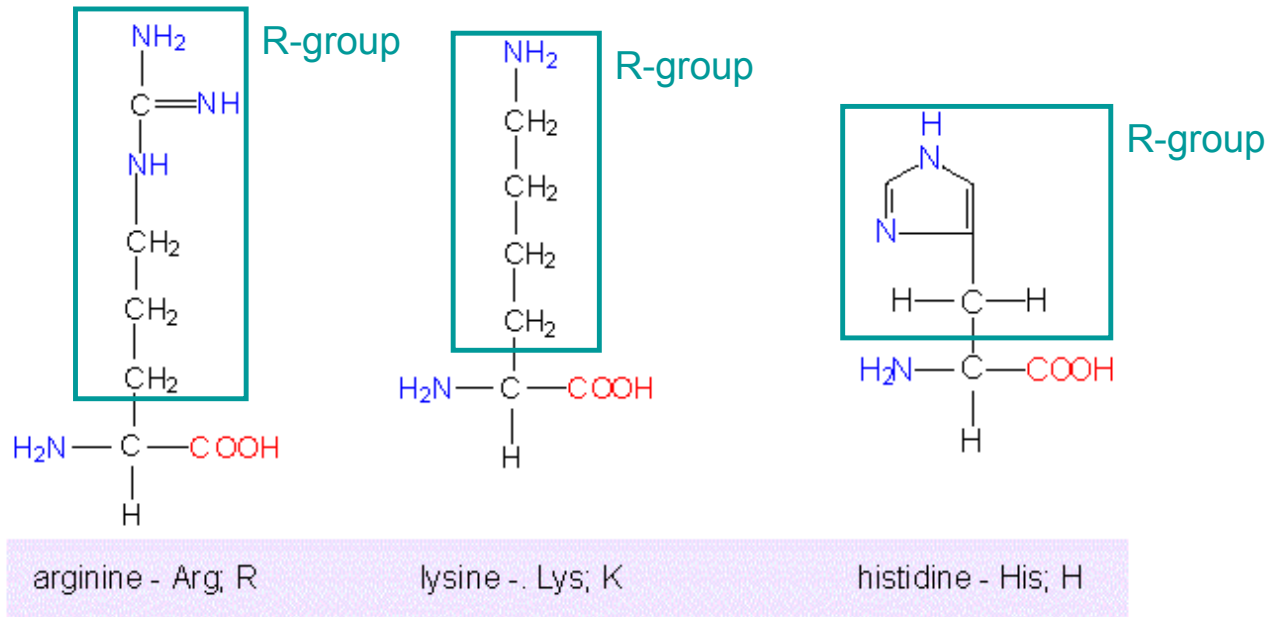
aspartic acid - Asp; D



glutamic acid - Glu; G

# Οικογένειες αμινοξέων (2/4)

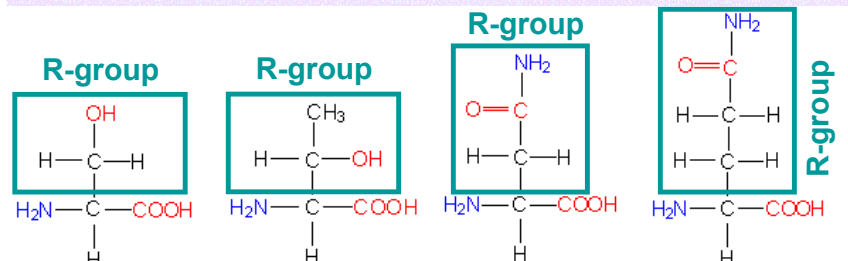
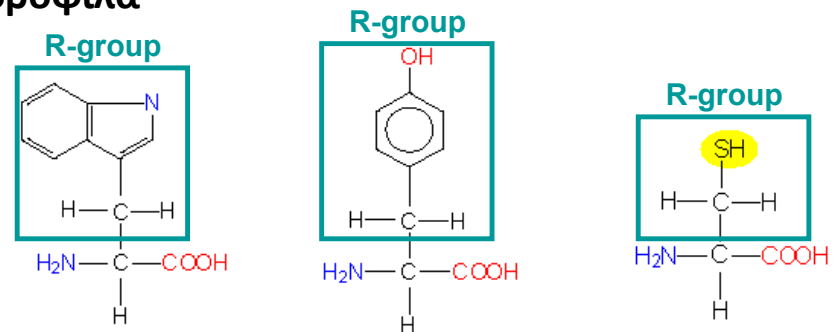
1. Όξινα – Έχουν αρνητικό φορτίο
2. Βασικά – Έχουν θετικό φορτίο
3. Πολικά, μη φορτισμένα - Υδρόφιλα
4. Μη πολικά - Υδρόφοβα





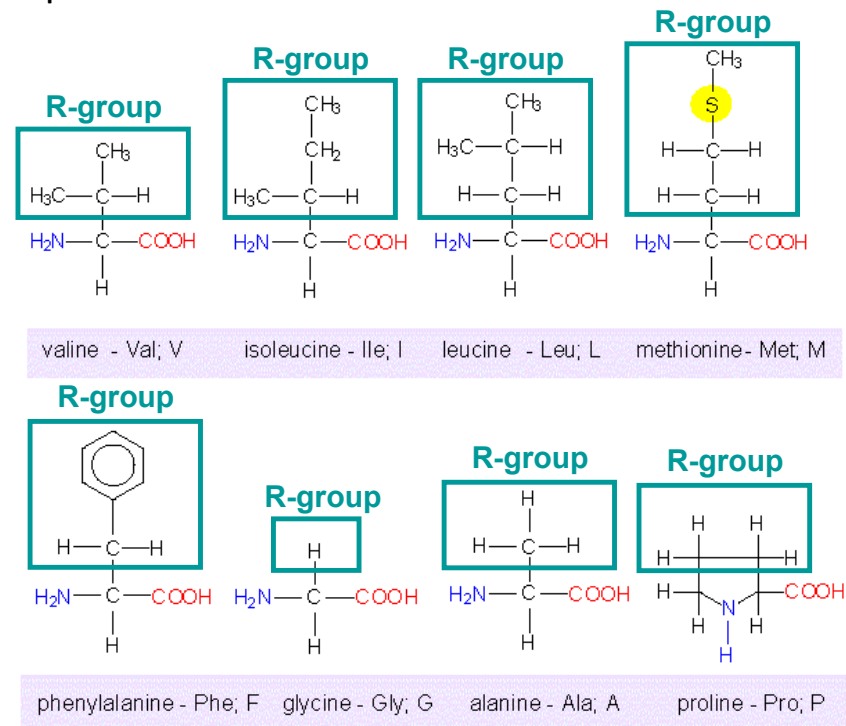
# Οικογένειες αμινοξέων (3/4)

1. Όξινα – Έχουν αρνητικό φορτίο
2. Βασικά – Έχουν θετικό φορτίο
3. Πολικά, μη φορτισμένα - Υδρόφιλα
4. Μη πολικά - Υδρόφοβα

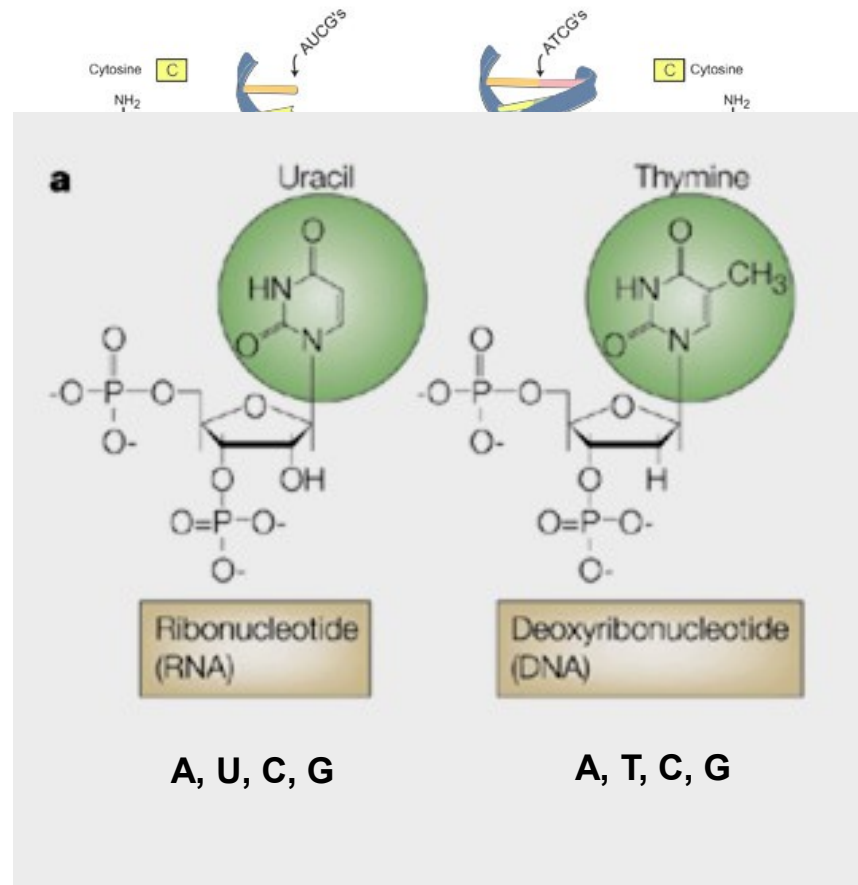


# Οικογένειες αμινοξέων (4/4)

1. Όξινα – Έχουν αρνητικό φορτίο
2. Βασικά – Έχουν θετικό φορτίο
3. Πολικά, μη φορτισμένα - Υδρόφιλα
4. Μη πολικά - Υδρόφοβα



# Διαφορές DNA και RNA



Talking Glossary of Genetic Terms. Available at: [www.genome.gov/Pages/Hyperion/DIR/VIP/Glossary/Illustration/ra.shtml](http://www.genome.gov/Pages/Hyperion/DIR/VIP/Glossary/Illustration/ra.shtml).



---

# Τέλος Ενότητας



Ευρωπαϊκή Ένωση  
Ευρωπαϊκό Κοινωνικό Ταμείο



Με τη συγχρηματοδότηση της Ελλάδας και της Ευρωπαϊκής Ένωσης



# Σημείωμα Αναφοράς

---

- Copyright Πανεπιστήμιο Δυτικής Μακεδονίας, Τμήμα Μηχανικών Πληροφορικής και Τηλεπικοινωνιών, Αγγελίδης Παντελής. «**Βιοπληροφορική**». Έκδοση: 1.0. Κοζάνη 2015. Διαθέσιμο από τη δικτυακή διεύθυνση: <https://eclass.uowm.gr/courses/ICTE102/>



# Σημείωμα Αδειοδότησης

Το παρόν υλικό διατίθεται με τους όρους της άδειας χρήσης Creative Commons Αναφορά, Όχι Παράγωγα Έργα Μη Εμπορική Χρήση 4.0 [1] ή μεταγενέστερη, Διεθνής Έκδοση. Εξαιρούνται τα αυτοτελή έργα τρίτων π.χ. φωτογραφίες, διαγράμματα κ.λ.π., τα οποία εμπεριέχονται σε αυτό και τα οποία αναφέρονται μαζί με τους όρους χρήσης τους στο «Σημείωμα Χρήσης Έργων Τρίτων».



[1] <http://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/>

Ως Μη Εμπορική ορίζεται η χρήση:

- που δεν περιλαμβάνει άμεσο ή έμμεσο οικονομικό όφελος από την χρήση του έργου για το διανομέα του έργου και αδειοδόχο
- που δεν περιλαμβάνει οικονομική συναλλαγή ως προϋπόθεση για τη χρήση ή πρόσβαση στο έργο
- που δεν προσπορίζει στο διανομέα του έργου και αδειοδόχο έμμεσο οικονομικό

# Διατήρηση Σημειωμάτων

---

Οποιαδήποτε αναπαραγωγή ή διασκευή του υλικού θα πρέπει να συμπεριλαμβάνει:

- το Σημείωμα Αναφοράς
- το Σημείωμα Αδειοδότησης
- τη δήλωση Διατήρησης Σημειωμάτων
- το Σημείωμα Χρήσης Έργων Τρίτων (εφόσον υπάρχει)

μαζί με τους συνοδευόμενους  
υπερσυνδέσμους.



# Σημείωμα Χρήσης Έργων Τρίτων

---

Το Έργο αυτό κάνει χρήση των ακόλουθων έργων:

Εικόνες:

- <http://www.iran-daily.com/1385/2689/html/062298.jpg>
- <http://www.pazinauka.com/img01/mikro-svet09.jpg>
- <http://pixdaus.com/pics/1214503445NTE7C66.jpg>
- <http://img3.nnm.ru/imagez/gallery/5/7/b/a/8/57ba81ed508a14a8734d01f8da24f418.jpg>
- [http://people.eku.edu/ritchisong/301images/Levels\\_organization3.jpg](http://people.eku.edu/ritchisong/301images/Levels_organization3.jpg)
- [http://www.phschool.com/science/biology\\_place/biocoach/images/cells/allcell.jpg](http://www.phschool.com/science/biology_place/biocoach/images/cells/allcell.jpg)
- <http://doctorexclusive.com/wp-content/uploads/2013/02/hormone-300x246.jpg>
- <http://seniorapbiologyreview.wikispaces.com/file/view/EukaryoticCell.jpg/82138973/425x380/EukaryoticCell.jpg>
- <http://doctorexclusive.com/wp-content/uploads/2013/02/hormone-300x246.jpg>
- <http://www.iayork.com/Images/2009/6-24-09/CTLvsTumorASM.jpg>
- [http://itg.beckman.illinois.edu/technology\\_development/web\\_atlas/structures/nucleus\\_actin/images/nucleus\\_actin.jpg](http://itg.beckman.illinois.edu/technology_development/web_atlas/structures/nucleus_actin/images/nucleus_actin.jpg)
- <http://www.weallhaveuniquebrains.com/wp-content/uploads/2013/11/nucleus.jpg>
- <http://withfriendship.com/images/f/29830/biological-macromolecules.gif>





# Σημείωμα Χρήσης Έργων Τρίτων (2)

---

Το Έργο αυτό κάνει χρήση των ακόλουθων έργων:

## Εικόνες:

- [http://2.bp.blogspot.com/\\_aza86ytQuKU/Syc8zdjzNHI/AAAAAAAAEYk/QiLTgr61Pyl/s400/dna.gif](http://2.bp.blogspot.com/_aza86ytQuKU/Syc8zdjzNHI/AAAAAAAAEYk/QiLTgr61Pyl/s400/dna.gif)
- <http://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/thumb/b/b8/DNA-structure-and-bases.png/180px-DNA-structure-and-bases.png>
- [http://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/thumb/a/a4/DNA\\_Overview\\_uk.png/220px-DNA\\_Overview\\_uk.png](http://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/thumb/a/a4/DNA_Overview_uk.png/220px-DNA_Overview_uk.png)
- [http://library.thinkquest.org/C004535/media/chromosome\\_packing.gif](http://library.thinkquest.org/C004535/media/chromosome_packing.gif)
- <http://www.xenophilia.com/news/dna.jpg>
- <http://magnesianews.gr/wp-content/uploads/2015/02/dna.jpg>
- <http://www.healthgiants.com/wp-content/uploads/2011/01/Genetic-Disorders-150x150.jpg>
- <http://images.tutorvista.com/cms/images/123/human-sex-chromosomes.jpeg>
- [http://img0.pclady.com.cn/pclady/1305/25/980078\\_123.jpg](http://img0.pclady.com.cn/pclady/1305/25/980078_123.jpg)
- <http://www.uic.edu/classes/bios/bios100/lecturesf04am/betasheet.jpg>



# Σημείωμα Χρήσης Έργων Τρίτων (3)

---

Το Έργο αυτό κάνει χρήση των ακόλουθων έργων:

## Εικόνες:

- [http://i2.wp.com/classconnection.s3.amazonaws.com/804/flashcards/1343804/png/screen\\_shot\\_2012-04-22\\_at\\_41109\\_pm1335136282642.png](http://i2.wp.com/classconnection.s3.amazonaws.com/804/flashcards/1343804/png/screen_shot_2012-04-22_at_41109_pm1335136282642.png)
- <http://upload.wikimedia.org/wikipedia/commons/a/a6/Protein-structure.png>
- <http://commons.wikimedia.org/wiki/File:StrukturaSekondare.jpg>
- <http://fai.unne.edu.ar/biologia/macromoleculas/figacro/primary.gif>
- [http://4.bp.blogspot.com/-3eMdXreKu7E/TVu-\\_059HLI/AAAAAAAAABU/N3weiAOJmtc/s1600/quaternary\\_structure.jpg](http://4.bp.blogspot.com/-3eMdXreKu7E/TVu-_059HLI/AAAAAAAAABU/N3weiAOJmtc/s1600/quaternary_structure.jpg)

