

## **ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΗ ΕΡΓΑΣΙΑ**

Δημιουργία εργαλείου για αναζήτηση πρωτομικής ομοιότητας βασισμένη  
πάνω σε δευτερογενή δομή.

**Δημήτριος Γ. Κοντός**

A.M.:ΠΙΒ055

**ΕΠΙΒΛΕΠΟΥΣΑ: Σοφία Κοσσίδα, Ερευνήτρια Γ'**

**ΕΞΕΤΑΣΤΙΚΗ ΕΠΙΤΡΟΠΗ: Σοφία Κοσσίδα, Ερευνήτρια Γ'**  
**Μαρούλης Δημήτρης, Καθηγητής**  
**Βλαχάκης Δημήτρης, Συνεργαζόμενος Ερευνητής ΙΙΒΕΑΑ**

**Αύγουστος 2014**

## ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Έχουν παρατηρηθεί στη φύση πρωτεΐνες που έχουν την ίδια λειτουργία, ανήκουν στην ίδια οικογένεια αλλά έχουν χαμηλή ταυτότητα αλληλουχίας (λιγότερο από 20%). Το πιο ενδιαφέρον όμως είναι ότι οι δευτεροταγείς δομές τους όταν προσδιορίστηκαν με κρυσταλλογραφία ακτίνων Χ έδειξε ότι μοιράζονται τα ίδια δομικά χαρακτηριστικά. Έτσι προέκυψε η ανάγκη για μια αναζήτηση ομοιότητας πρωτεϊνών σε δευτεροταγείς δομικές πληροφορίες που σε συνδυασμό με την κλασική αναζήτηση BLAST ομοιότητα αλληλουχίας θα μπορούσε να βοηθήσει στην έρευνα για την αναδίπλωση της πρωτεΐνης στο χώρο.

Στη εργασία αυτή αναπτύξαμε ένα web rmi java applet εργαλείο μέσω του οποίου ο τελικός χρήστης έχει τη δυνατότητα να συνδυάσει τα αποτελέσματα στοίχισης της αμινοξικής του ακολουθίας αλλά και τα αποτελέσματα της αντίστοιχης δευτεροταγής της ακολουθίας με γνωστές PDBs ακολουθίες. Για τη δυνατότητα μετατροπής μιας αμινοξικής στην αντίστοιχη δευτεροταγή υπάρχουν πολλοί αλγόριθμοι πρόβλεψης. Στη παρούσα εργασία στηριχθήκαμε στον αλγόριθμο που χρησιμοποιεί το Strap εργαλείο.

**ΘΕΜΑΤΙΚΗ ΠΕΡΙΟΧΗ:** Δευτεροταγής στοίχιση πρωτεϊνών

**ΛΕΞΕΙΣ ΚΛΕΙΔΙΑ:** blast, sfs, dssp.