

ΠΡΟΤΕΙΝΟΜΕΝΑ ΘΕΜΑΤΑ ΔΙΠΛΩΜΑΤΙΚΩΝ ΕΡΓΑΣΙΩΝ

ΑΚ. ΕΤΟΣ 2025-2026

ΕΠΙΒΛΕΨΗ: ΦΑΔΟΥΛΟΓΛΟΥ (fadoulog@mbg.duth.gr)

1. Αφυδρογονάσες γλουταμικού: Υπολογιστική Μελέτη της καταλυτικής ειδικότητας και ρύθμισης σε πολλαπλά βιολογικά συστήματα

Οι αφυδρογονάσες του γλουταμικού είναι ενζυμα απαραίτητα σε όλα τα επίπεδα της ζωής από τα βακτήρια μέχρι τον άνθρωπο. Η δομή της πρωτεΐνης έχει εξελιχθεί από πιο απλά τετραμερή (βακτήρια, αρχαία) σε πιο πολύπλοκα εξαμερή, με προσθήκη μιας επιπλέον δομικής επικράτειας (αντέννα) που χρησιμοποιείται για τη ρύθμιση της λειτουργίας της πρωτεΐνης στα ανώτερα θηλαστικά όπου το γλουταμικό παίζει και ρόλο νευροδιαβιβαστή.

Σε αυτή την εργασία θα γίνει μια συστηματική καταγραφή και ανάλυση των αφυδρογονασών του γλουταμικού που έχουν προσδιορισμένη δομή. Από τη συγκριτική μελέτη προσδιορισμένων συμπλόκων του ενζύμου με υποστρώματα, συμπαραγόντες και αλλοστερικούς ρυθμιστές θα επιχειρηθεί η κατανόηση της εξέλιξης της καταλυτικής ειδικότητας και της ρύθμισης των μελών της οικογένειας.

2. AlphaFold vs Πειραματική Πραγματικότητα: Ακρίβεια Πρόβλεψης Δομικών Αλλαγών από Σημειακές Μεταλλάξεις

Μπορεί να γίνει με ακρίβεια η πρόβλεψη μικρών δομικών αλλαγών που προκύπτουν από μικρες αλλαγες στην αμινοξική αλληλουχία και που έχουν σημαντικές λειτουργικές επιπτώσεις; Σύγκριση πειραματικά προσδιορισμένων και προβλεπόμενων δομών.

3. In silico ανάλυση της ορμονο-εξαρτώμενης λειτουργίας του εγκεφάλου στον άνθρωπο μέσω οιστρογονικής αλλοστερικής ρύθμισης των GDH ισομορφών

Έχει δειχθεί ότι τα οιστρογόνα αλληλεπιδρούν ισχυρότερα με μια από τις δύο ανθρώπινες ισομορφές της γλουταμικής αφυδρογονάσης (hGDH). Συγκεκριμένα έχει δειχθεί ότι η λειτουργία της hGDH2 (που είναι η ισομορφή που κυριαρχεί στον εγκέφαλο) επηρεάζεται πιο δραστικά από τις γυναικείες στεροειδείς ορμόνες απ ότι η ισομορφή hGDH1 (που επικρατεί στο υπόλοιπο σώμα).

Θα επιχειρήσουμε να κατανοήσουμε την μοριακή βάση αυτής της διαφοροποίησης χρησιμοποιώντας εργαλεία δομικής και βιοπληροφορικής ανάλυσης.

4. Προσαρμογές σε Ακραίες Συνθήκες: Δομική Εξέλιξη Αλδεϋδικών Αφυδρογονασών από Εξτρεμοφίλους οργανισμούς μέχρι τον Άνθρωπο

Οι αλδεϋδικες αφυδρογονάσες συναντώνται σε όλους τους οργανισμούς από τα βακτήρια και τα αρχαία μέχρι τα ανώτερα θηλαστικά και τον άνθρωπο.

Πρόσφατα δομικά δεδομένα από μέλη της οικογένειας σε εξτρεμόφιλους οργανισμούς θα χρησιμοποιηθούν για σύγκριση προκειμένου να κατανοηθούν οι μοριακές προσαρμογές που επιτρέπουν σε αυτές τις πρωτεΐνες να είναι λειτουργικές ακόμα και σε ακραίες συνθήκες.