

Szerkezeti bioinformatika

0: <https://goo.gl/forms/FYmKzIqiggKJ3Kt1>

1: Fehérje térszerkezeti adatbázisok

- Keressük meg a fehérjénket az UniProt adatbázisban (<http://www.uniprot.org/>). Milyen szerkezeti információkat találunk itt?
- Az itt megtalálható adatok alapján melyik a „legjobb” elérhető szerkezet a fehérjénkhez és miért?
- A legtöbb fehérje csak bizonyos részéhez (részeihez) érhető el szerkezet. Mit gondolsz miért van ez?
- A *Select the link destinations*-t állítsd RCSB PDB-re és kövesd a térszerkezet linkjét a PDB adatbázisra (*Entry*).
- Kik, mikor és hol publikálták a szerkezetet? Milyen módszerrel készült a szerkezet? Mekkora a felbontása?
- Tartalmaz a szerkezet a keresett fehérjén kívül valamilyen egyéb molekulát? Ha igen mit?
- Az aminosavak hány százaléka számít kiveresőnek a Ramachandran plot szerint (*Structure Validation*)?
- Milyen biológiai folyamatokban vesz részt a fehérjénk? (GO annotációk)
- Milyen a fehérjénk másodlagos szerkezeti felépítése? Hány százaléka hélix?
- Mentsd le a PDB file-t (*Download Files* → *PDB File (Text)*)!

2: Fehérje térszerkezet vizsgálatok JMOL programmal

- Nyissuk meg a JMOL programot, töltsük be a DYNLL1 (LC8) fehérje monomer szerkezetét.
File → *Get PDB* → *5e0m* → *OK*
- Mozgassuk, forgassuk a molekulát az egér használatával. Közelíteni, távolítani a görgő segítségével tudunk.
- Ábrázoljuk a fehérjét masni ábrázolással. Mit mutat ez a fajta ábrázolásmód?
Jobb klikk → *Style* → *Structure* → *Cartoon*
- Színezzük ki a fehérjét a másodlagos szerkezeti elemek alapján
Jobb klikk → *Color* → *Structure* → *Cartoon* → *By scheme* → *Secondary structure*
- Jelenleg a teljes molekula ki van jelölve. Töröljük ezt a kijelölést.
Jobb klikk → *Select* → *None*
- Állítsuk be a kijelölés méretét aminosavakra.
Jobb klikk → *Set picking* → *Select group*
- Jelöljük ki egy tetszőleges aminosavat kattintással. A bal alsó sarokban látni fogjuk melyik aminosavat jelöltük ki. Jelenítsük meg azt az aminosavat „stick” ábrázolással
Jobb klikk → *Style* → *Scheme* → *Sticks*

- h) Az ábrázolt fehérjében két peptid lánc van. Jelöljük ki a kisebbet, majd ábrázoljuk „stick”-ként az ismert módon. A kijelöléshez a kijelölés méretét állítsuk „molecule”-ra. Ha megfelelően ki tudtuk jelölni a ligandumot a „Select” menüpontnál a zárójelben 138-nak kell szerepelnie.
- i) Vizsgáljuk meg milyen távolságban van a ligand a fehérjétől.
Jobb klikk → Measurements → Click for distance measurement
Válasszunk ki egy atomot a ligandumban kattintással, valamint egy hozzá közeli pontot a főláncon. *Milyen távol van a ligand a főlánctól átlagosan?*