1. Feladat

Keress rá a UniProt-ban az ASTA\_YERPE azonosítóra.

Melyik ez a fehérje?

Melyik fajból származik?

Van hozzá ismert szerkezet?

A Uniprot oldalán találsz egy linket, amivel a MODBASE adatbázisban meg tudod keresni a szerkezetmodellt.

Milyen jellemzői vannak a modellnek?

Mi a templát?

A célfehérje mely részét fedi le a modell?

Mekkora a szekvenciaazonosság?

A paraméterek melletti kérdőjelre kattintva elolvashatod, hogy melyik érték mit jelent. A modell minőségét az MPQS és a Z-DOPE értékek jellemzik. Mit gondolsz, megbízható ez a modell?

A MODBASE több modellt is készített. A tulajdonságokat megnézheted, ha az egeret a szerkezet fölé húzod.

Mindegyik szerkezet ugyanazon PDB szerkezet alapján készült?

Mi az előnye annak, ha több modell is van?

Nyisd meg a Chimera-t és a ‘Fetch Structure by ID’ lehetőségénél válaszd a ModBase lehetőséget: a uniprot ID-t írd be.

Több szerkezetet fog beolvasni. MatchMakerrel illeszd össze a szerkezeteket. Próbáld megnézni, hogy a legkisebb szerkezet hová került az illesztés során! (Pl. színezd más színűre.) Ez a szerkezet nagyon elüt a többitől, rejtsük el az ábráról.

Keresd meg a 198-210 szakaszt. Megbízhatónak tűnik-e ez a régió?

2. Feladat

A ciklinek eukarióta fehérjék, amelyek a sejtciklus szabályozásában vesznek részt. A ciklineket négy fő csoportba soroljuk (A, B, C és D), melyek a sejtciklus különböző szakasziban különböző CDK-kat (ciklin dependens kináz) kötnek meg. Az A típusú ciklineknek az emlődökben két változata van: a minden szövetben kifejeződő Ciklin A2, illetve a hímivarsejtekre specifikus Ciklin A1. Míg a Ciklin A2 szerkezete jól ismert, addig a Ciklin A1-hez ezidáig nem sikerült szerkezetet meghatározni. Készítsünk egy modellt a SWISS-MODEL segítségével. <https://swissmodel.expasy.org/>

Keresd meg a humán Ciklin A1-et a UniProtban. Töltsd fel a szekvenciát a SWISS-MODEL-be és keress templátokat.

A fehérje mely részeihez illeszkednek a templátok?

Milyen doménhez tartoznak (InterPro)?

Kattints a szekvencia hasonlóság fülre.

Hogyan klaszterezik a templát találatokat? Melyik csoporthoz tartoznak?

Mennyire jó az alignment?

Mennyi gap van?

Válassz egy szerkezetet és építs modellt.

Ismételd meg a modellépírést egy másik szerkezettel is és hasonlítsd össze a modelleket.

Melyik templátot választanád, ha azt szeretnéd modellezni, hogy hogyan köti mega Ciklin A1 az ATP-t?

Ellenőrizd a modell minőségét. Mely régiók a rosszabb minőségűek?

3. Feladat

Keresd meg a GADD45B UniProt oldalát (O75293). Van hozzá szerkezeti információ?

Menj a HHpred oldalára: [**https://toolkit.tuebingen.mpg.de/#/tools/hhpred**](https://toolkit.tuebingen.mpg.de/#/tools/hhpred)

Illeszd be a GADD45B szekvenciáját. Az egyetlen változtatható opció a templátokat tartalmazó adatbázis. Szerkezetet akarsz modellezni, melyik adatbázist érdemes választani? Kezdd el a keresést.

Melyik a legjobb találat?

Mi a legjobb találathoz tartozó E-score és szekvenciaazonosság? Elegendő a hasonlóság ahhoz, hogy modellt építhessünk?

Mennyire egyezik meg a templát és a célfehérje prediktált másodlagos szerkezete?

Építsd meg a modellt! Használt a legjobb alignmentet.

Modeller code: MODELIRANJE

Nézd meg a modell minőségét jellemző pontokat!

Vannak régiók, akol a modell kevésbé tűnik megbízhatónak?

Mentsd el a modellt.

Olvasd be a Chimera-ban. Jó szerkezetnek látszik? (pl. Látsz H-kötéseket? A hidrofób aminosavak eltemetettek, mint ahogyan azt várnánk?)