

Biokémia gyakorlat számítógépes feladatok

2015.04.20/23

I. PDB adatok

Válasszon ki egy tetszőleges PDB kódot, ami:

- tartalmaz legalább egy fehérje láncot
- a kód tartalmazza az Ön nevének kezdőbetűit (ékezeteket elhagyva; például Kovács Álmós esetén az 1kat jó választás, zs esetén elég a z-t figyelembe venni Kovács Zsófi esetén a 1kzp.)

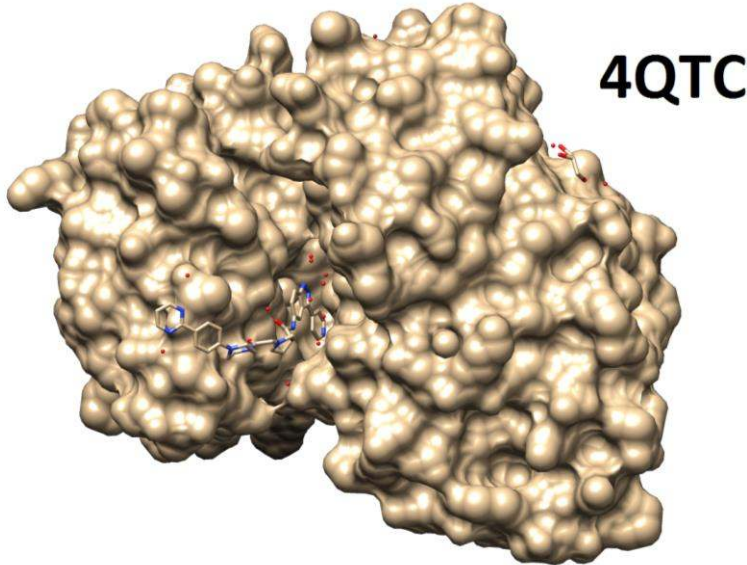
Ehhez használhatja a keresés opciót a PDB honlapján (<http://www.rcsb.org/pdb/home/home.do>)

1) Adja meg a kiválasztott PDB kódot: <i>1HTR</i>	max: 0,5 pont
2) Hány fehérje láncot tartalmaz a szerkezet? <i>2</i>	max: 0,5 pont
3) Milyen módszerrel határozták meg a szerkezetet? <i>Röntgen diffrakció</i>	max: 0,5 pont
4) Mi ez a fehérje, mi a funkciója? A PDB-fájlban található információk alapján írjon egy-két mondatot: <i>A fehérje az aszpartát proteázok csoportjába tartozik, vagyis aktív centrumában található aszpartát csoportok segítségével a fehérjékben található peptidkötések hidrolízise révén lebontják a fehérjéket kisebb peptidekre.</i>	max: 0,5 pont
5) Mi a térszerkezetben látható legelső aminosav első atomjának y koordinátája (mértékegységgel együtt)? NMR szerkezet esetén az első modellt vegye figyelembe! <i>12.006 Å</i>	max: 0,5 pont

Összesen max: 2,5 pont

II. Uniprot adatok

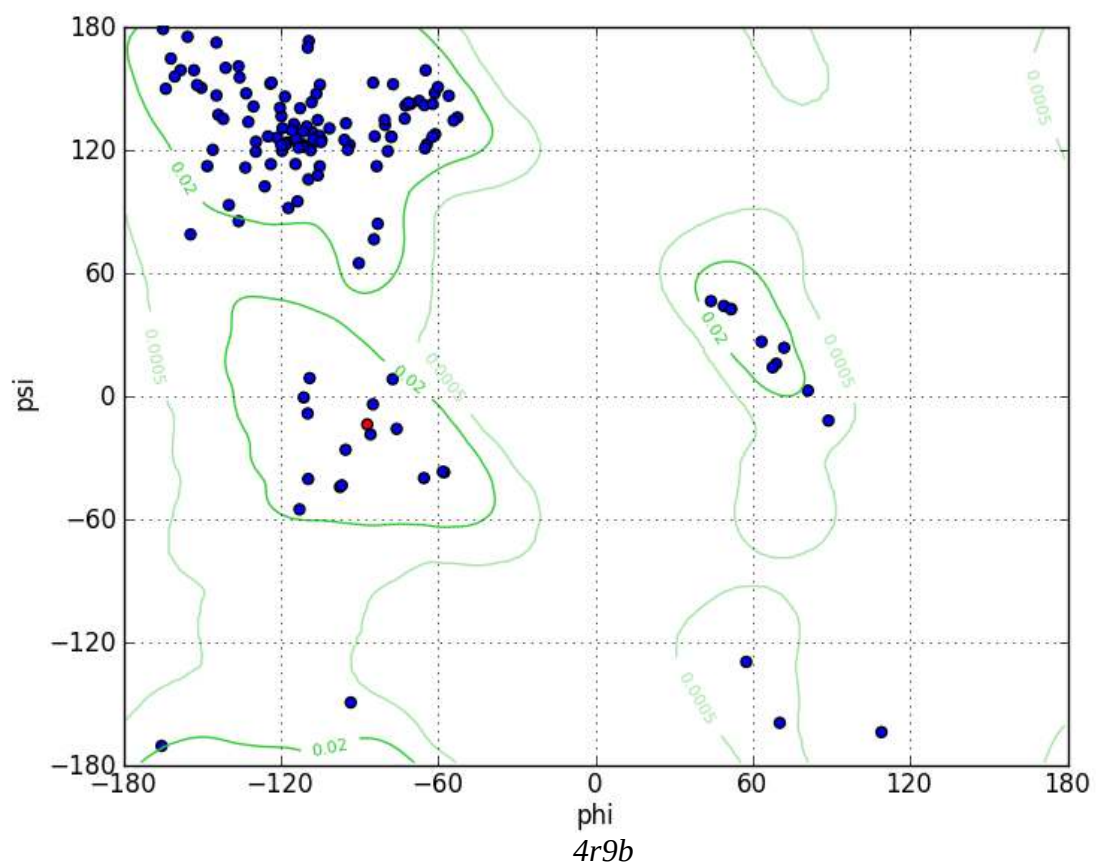
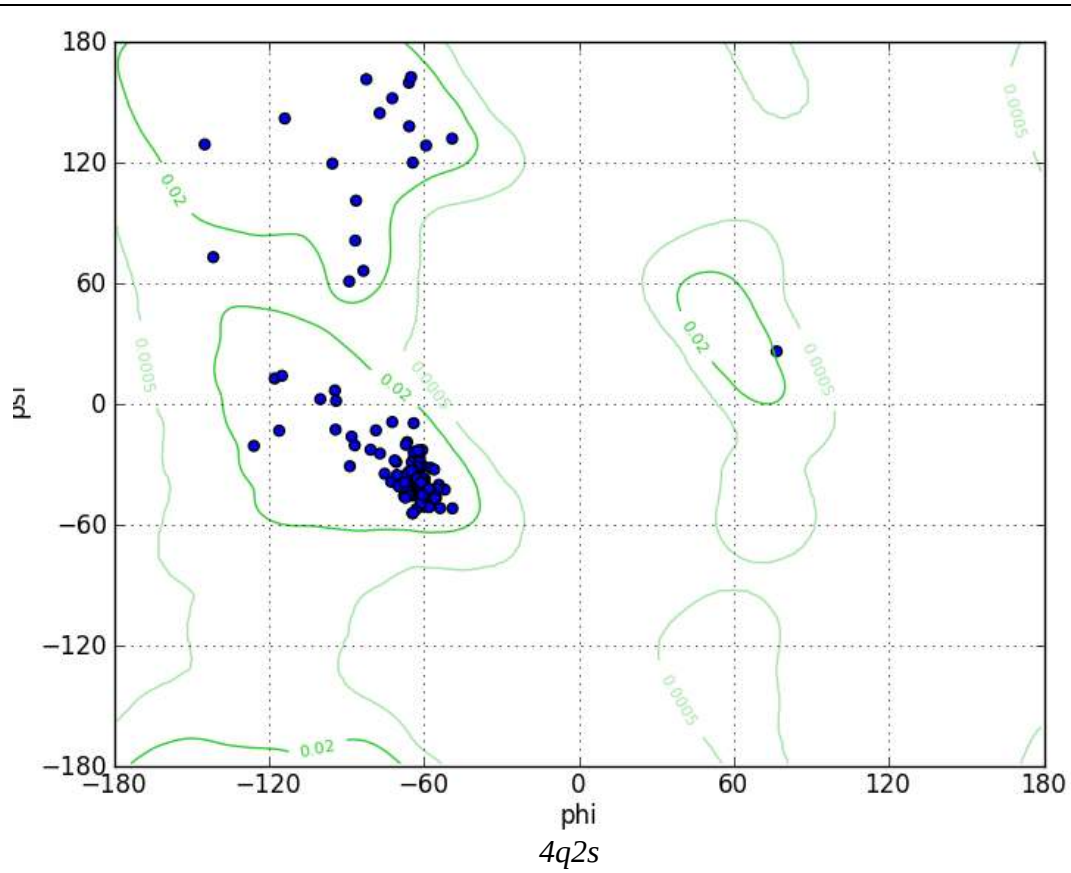
Keresse meg a következő Uniprot kódhoz tartozó fehérjét: **Q8TF76**. Keresse ki a Uniprot adatok közül az alábbi információkat:

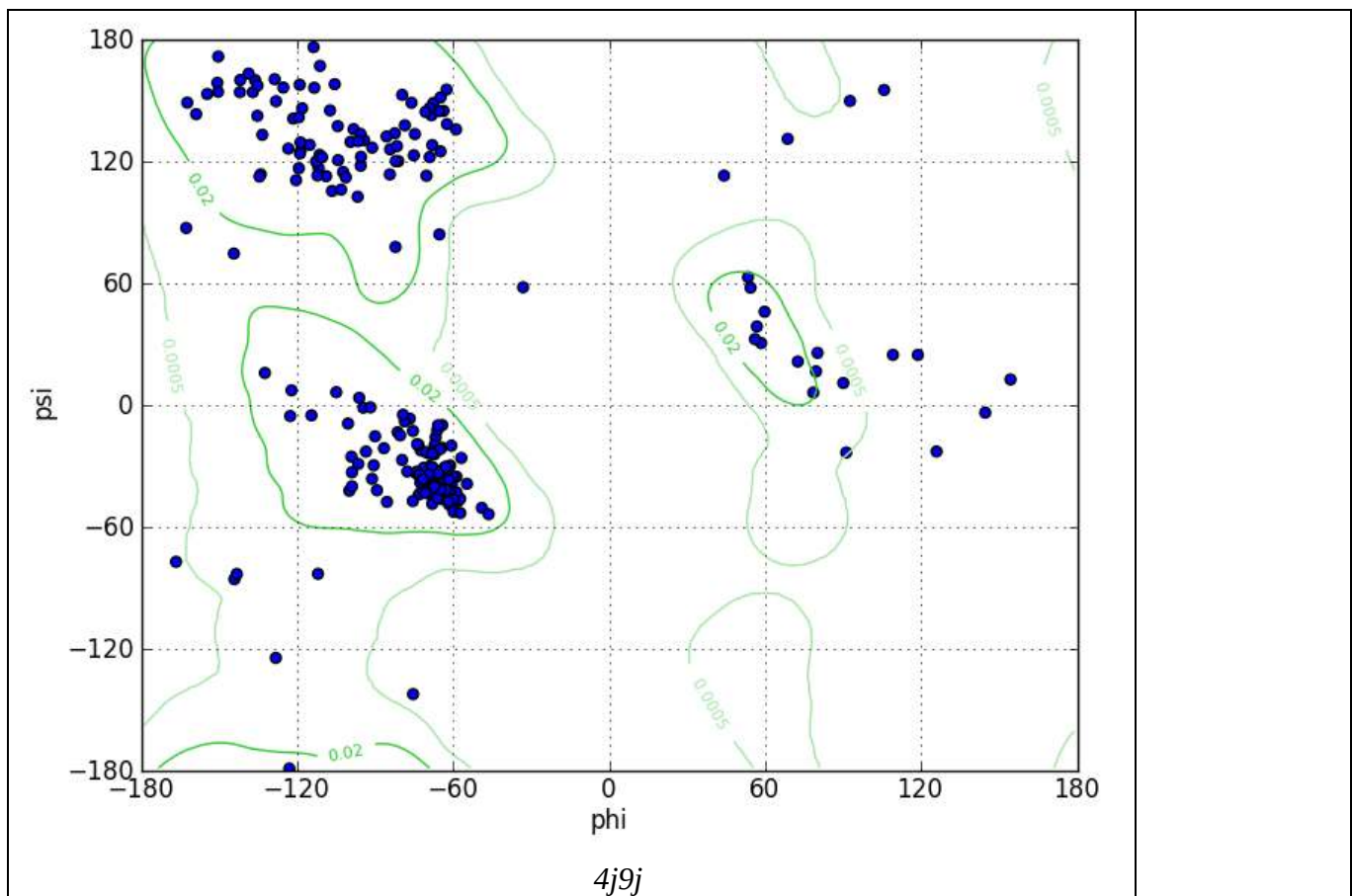
1) Milyen fajból származik a fehérje? <i>Homo sapiens</i>	max: 0,5 pont
2) Milyen reakciót katalizál (katalitikus aktivitás) és hol van a fehérjében az aktív centrum? $ATP + a\ protein = ADP + a\ phosphoprotein$ <i>Aktív centrum: 649</i>	max: 0,5 pont
3) Válassza ki a UniProtban megadott <u>legjobb felbontású</u> szerkezetet és olvassa azt be Chimerában! Ábrázolja a fehérje felszínét, a ligandumot pedig jelenítse meg pálcikával. Fordítsa az ábrát úgy, hogy ligandum látható legyen. Írja rá az ábrára a PDB szerkezet kódját. Mentse el az ábrát és illessze be a dokumentumba:	max: 1 pont
	
4) A UniProtban felsorolt szerkezetekben a teljes fehérje mely részei látszanak (körülbelüli határok elegendők)? Ez a teljes fehérjének mekkora részét fedi le? Mire utalhat ez a fehérje többi részének szerkezetével kapcsolatban? <i>465-798 – Ez kb. a fehérje második fele. Valószínűleg a „szorosabban pakolt” belső részt ábrázolják, mivel ez a régió fontos igazán a funkció szempontjából, így tehát a többi rész bizonyára lazább szerkezetű.</i>	max: 0,5 pont

Összesen max: 2,5 pont

III. Másodlagos szerkezetek

1) Milyen másodlagos szerkezeti elemek dominálnak az alábbi szerkezetekben? • 4q2s α-helix • 4r9b β-redő • 4j9j közel azonos arányban vannak jelen	max: 1 pont
2) Ábrázolja a három szerkezetet, a fehérjén kívül mindent eltávolítva róla. Ábrázolja a fehérje szerkezeteket szalagként (ribbon), és színezza a másodlagos szerkezet szerint. Írja rá az ábrára a PDB szerkezet kódját. Mentse el az ábrát és illessze be a dokumentumba: 4q2s 4r9b 4j9j The image displays three protein structures as ribbon diagrams. The first structure, labeled 4q2s, is primarily composed of red α-helices. The second structure, labeled 4r9b, is primarily composed of blue β-strands. The third structure, labeled 4j9j, is a complex of both red α-helices and blue β-strands.	max: 1,5 pont
3) Generálja le ezeknek a fehérjéknek a Ramachandran plotját! Mentse el a Ramachandran ábrákat és illessze be a dokumentumba:	max: 1 pont



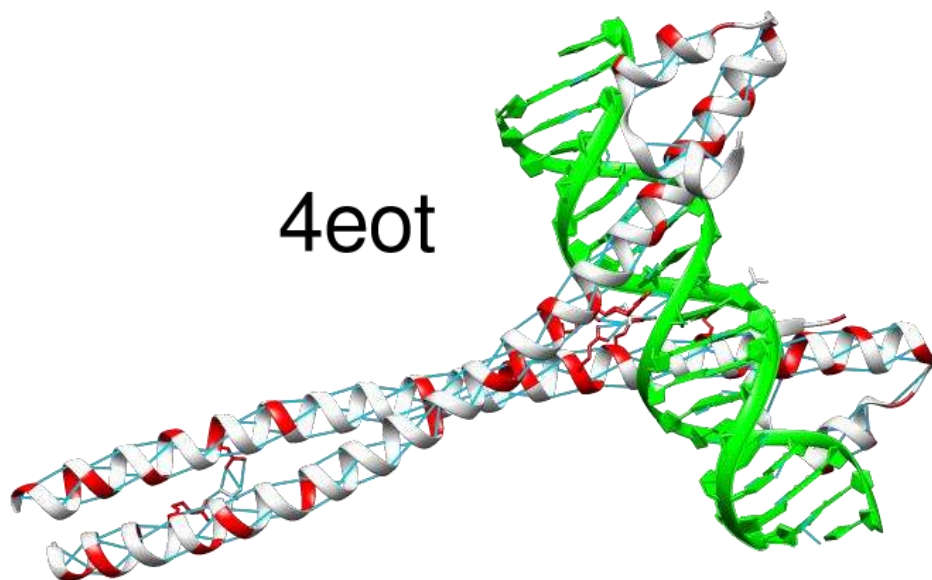


Összesen max: 3,5 pont

IV. Fehérjéket/DNS-t stabilizáló kölcsönhatások

Olvassa be a PDB kódú fehérjét a Chimérába!

1) Milyen kötések tartják össze a DNS lánc két szálát? <i>Hidrogén-kötések</i>	max: 0,5 pont
2) Jellemzően hol találunk ilyen kötések a fehérjékben, például ebben a szerkezetben? Ezekben a kötésekben főleg a főlánc, vagy a mellékláncok atomjai vesznek részt? <i>Jellemzően a peptidláncot alkotó aminosavak amino csoportjai közt alakul ki hidrogén híd, így tehát főleg a főlánc atomjai vesznek részt.</i>	max: 0,5 pont
3) Jelenítse meg az összes hidrogén-hidat a szerkezetben. Ezek után válassza ki az összes pozitívan töltött aminosavat a fehérje láncokban és színezza pirosra! Ezek alapján mit gondol, milyen kölcsönhatás alakul ki a fehérje és a DNS között? Milyen a DNS töltése? <i>A fehérjelánc jelentős része pozitívan töltött, a DNS molekula pedig a foszfát váz miatt negatívan töltött, ezért úgy gondolom, hogy közöttük dipól-dipól kölcsönhatás alakul ki.</i>	max: 1 pont
4) Színezza az egyik fehérje láncot fehérre, a másikat világoszürkére! A DNS két láncát színezza tetszőleges színűre! Az előző pontban leírtakhoz hasonlóan jelölje a hidrogén kötések, valamint a fehérje láncok pozitívan töltött aminosavait színezza pirosra. Mind a DNS, mind a fehérje legyen szalag (ribbon) ábrázolásban. Az ábrára írja rá a PDB szerkezet kódját. Mentse el az ábrát és illessze be a dokumentumba:	max: 1,5 pont



Összesen max: 3,5 pont

Amire érdemes figyelni:

- A fehérje jól látható legyen.
- Az elmentett ábrákon ne legyen semmi kijelölve.
- Legyen rajta a PDB kód.

BEKÜLDÉS

Az elkészült dokumentumot küldje el a meszaros.balint@ttk.mta.hu email címre.
A tárgyban szerepeljen a „Biokémia gyakorlat” megjelölés, a csatolt file nevében pedig szerepeljen az Ön neve!