

## **Identifikace proteinů**

### ***Základy práce s databázemi***

Seznámíme se s nejdůležitějšími zdroji dat a nástroji pro studium proteinů přístupných na Internetu. Použití si vyzkoušíme na několika praktických příkladech v počítačové učebně a studenti vypracují několik praktických úkolů.

### **Typy zdrojů informací a nástrojů**

Doc. Dr. Zbynek Zdrahal ([zdrahal@sci.muni.cz](mailto:zdrahal@sci.muni.cz))  
<http://www.sci.muni.cz/LMFR/Proteomika.html>

#### **1. Základní data**

– sekvence

- NCBI (<http://www.ncbi.nlm.nih.gov/>)
- Entrez (<http://www.ncbi.nlm.nih.gov/Entrez/>)
- Expasy (<http://www.expasy.ch/>)
- SwissProt (<http://www.expasy.ch/sprot/>)

– struktura

- PDB (<http://www.rcsb.org/pdb/>)

#### **2. Nástroje**

– analýza sekvence, srovnávání více sekvencí

- odkaz na Biology Workbench (<http://workbench.sdsc.edu/>)
- CLUSTAL
- BLAST
- PHYLIP

– zobrazení struktury

- PDB Java Viewer
- Cn3D (<http://www.ncbi.nlm.nih.gov/Structure/CN3D/cn3d.shtml>)
- Swiss Pdb Viewer (<http://www.expasy.ch/spdbv/mainpage.htm>)
- Chime (<http://www.mdli.com/support/chime>)

– předpovídání struktury

- Swiss Model (<http://www.expasy.ch/swissmod/SWISS-MODEL.html>)
- I-TASSER (<http://zhanglab.ccmb.med.umich.edu/I-TASSER/>)

– komplexní

- Biology WorkBench (<http://workbench.sdsc.edu/>)
- SwissProt Tools (<http://www.expasy.ch/tools/>)

#### **3. Odvozená a speciální data**

– podobnosti mezi druhy

- COG (<http://www.ncbi.nlm.nih.gov/COG/>)

– domény

- PROSITE (<http://www.expasy.ch/prosite/>)

– typy skládání

- SCOP (<http://scop.mrc-lmb.cam.ac.uk/scop/>)

– fosforylační místa

- PhosphoBase (<http://www.cbs.dtu.dk/databases/PhosphoBase/>)

– hmotnostní spektra pro MALDI-TOF, 2-D gely, identifikace z gelu

- SwissProt 2-D PAGE (<http://www.expasy.ch/ch2d/>)
- PeptideSearch (<http://www.mann.embl-heidelberg.de/GroupPages/PageLink/peptidesearchpage.html>)

- ProteinProspector (<http://prospector.ucsf.edu/>)
- nomenklatura enzymů
- SwissProt ENZYME (<http://www.expasy.ch/enzyme/>)
- pohyby proteinů
- MolMovDB (<http://bioinfo.mbb.yale.edu/MolMovDB/>)

### Vyhodnocení MS dat (samostatná práce)

Po seznámení se s nejdůležitějšími zdroji dat a nástroji pro studium proteinů přístupných na Internetu data získaná MALDI-TOF analýzou (hmoty peptidů) zadáme do prohledávacího programu Mascot (Matrix Science) s příslušnými parametry a identifikujeme proteiny z jednotlivých skvrn.

#### **Poznámka:**

Proteolytické štěpení a MALDI-TOF analýza bude provedena z části demonstrační formou z časových a kapacitních důvodů. Studenti obdrží seznam hmot peptidů pro každý analyzovaný vzorek a vlastní identifikaci proteinů si každý student provede sám.



2) stažení souborů obsahujících úplnou informaci o polohách atomů z databáze PDB

The screenshot shows the RCSB PDB website interface. At the top, the search bar contains the ID '1D07'. The main content area displays the title 'Hydrolytic haloalkane dehalogenase 1inb from Sphingomonas paucimobilis UT26 with 1,3-propanediol, a product of debromination of dibromopropane, at 2.0Å resolution'. The 'Download Files' button is highlighted with a red circle. The 'Biological Assembly' section shows a 3D ribbon diagram of the protein structure.

3) Vizualizace PDB souborů a pozorování (+interpretace) strukturních rozdílů - např. s nástrojem Swiss Pdb Viewer

The screenshot shows the DeepView / Swiss-PdbViewer 3.7 (SP5) software interface. The main window displays a 3D ribbon diagram of a protein structure. The 'File' menu is open, showing options like 'Open...', 'Save', 'Save As...', 'Print...', etc. The 'Control Panel' on the right shows a list of atoms and residues. The 'Alignment' window at the bottom shows a sequence alignment.