

Hledání 3-D konformace strukturně podobných proteinů (samostatná práce)

doc. dr. Jaromír Marek, Ph.D. (marek@chemi.muni.cz)

Úkol: s pomocí databáze PDB určete známou(é) 3-D strukturu(y) proteinu podobnou(é) zadané sekvenci aminokyselin a stručně popište výsledek

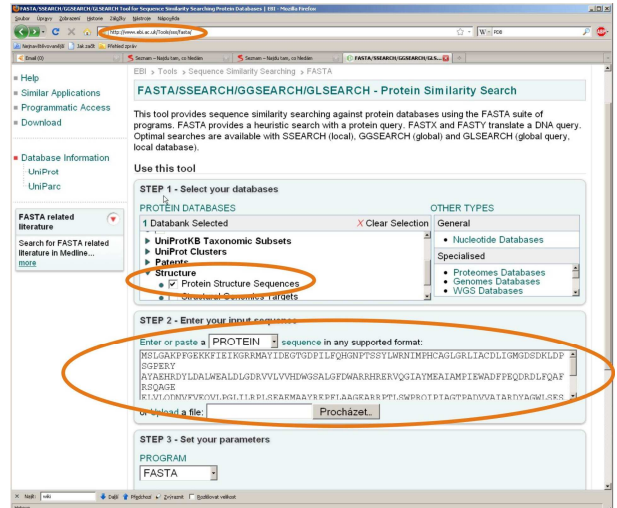
Nástroje:

- 1) <http://www.ebi.ac.uk/Tools/fasta33/index.html> - vyhledávání podobných sekvencí
- 2) databáze proteinových struktur PDB, <http://www.rcsb.org/pdb/home/home.do>
- 3) Swiss Pdb Viewer (<http://spdbv.vital-it.ch/>)

Příklad: hledání struktur podobných k haloalkan dehalogenáze LinB ze *Sphingomonas paucimobilis* UT26.

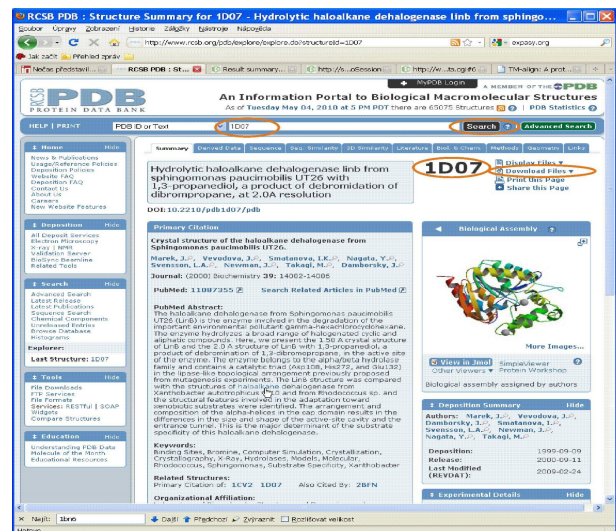
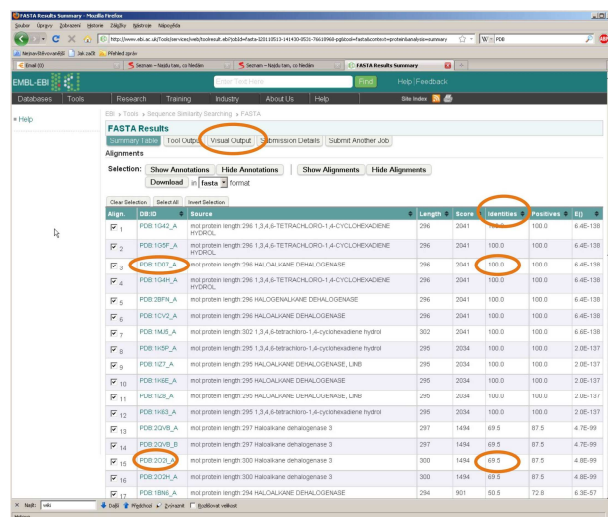
sekvence (ve formátu FASTA)

```
>1D07 : A | PDBID | CHAIN | SEQUENCE
MSLGAKPFGKPKFIEIKGRRMAYIDETGDPILFQHGNTSSYLWRN
IMPHCAGLDRLIACDLIGMDSKDLDPGPERY
AYAHEGRYLDLWEALDLDGDRVVLVVDWGSALGFDWARRHRRVQGIAYMEAIAMPIEWADFPQDRDLFQAFRSQAGE
ELVLDQNVFVEQVLPGLILRPLSEAEMAAYPFLAAGEARRPTLSWRPQIPIAGTPADVVAIARDYAGWLSESPIPKLF
INAEFGALTTGRMRDFCRTWPNQTEITVGAHF IQEDSPDEIGAAIAAFVRLRPA
```



Postup:

- 1) hledání pomocí nástroje FASTA, identifikace PDB identifikátorů



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

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

