

BIOINFORMATIKA V PRAXI – CVIČENÍ 7

PREDIKCE VLASTNOSTÍ PROTEINŮ ZÁKLADNÍ FYZIKÁLNĚ-CHEMICKÁ CHARAKTERISTIKA PROTEINŮ

STUDIJNÍ MATERIÁLY

The ExPASy (Expert Protein Analysis System) proteomics server of the Swiss Institute of Bioinformatics (SIB), <http://www.expasy.org/>.

ÚKOL 1

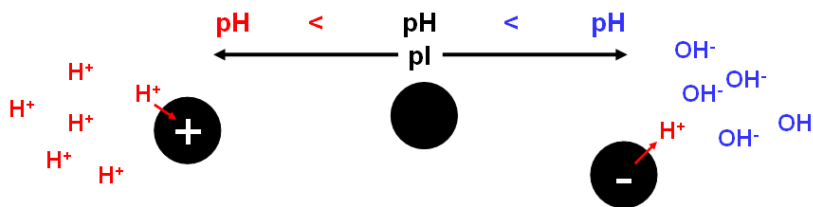
Pomocí programu **Compute pI/Mw** (http://web.expasy.org/compute_pi/) určete teoretickou molekulovou hmotnost a izoelektrický bod proteinu.

```
RVLMEILFDMTRSPIDIELIFLKVVKVSETALEMAVEFPQRWCHGARQGSIPNALVAEQIVVLAARVDRPLTIS  
VEAAVKSI FELIS P S PVELQSSTGKAAYDFGGKLYSTADADTRNGNIQGLRIHYSFLFLDMHPKEGMLEGI AVFT  
SVVPTDEDIGNSPSKKTKLSRAPYYDGFHAGTIQATTNYAEKSKQTLMLEGNNVKLHDYQQAKECVLGNHAWPDL  
RKNRGGLEGRCDNL
```

Izoelektrický bod - pI

- Izoelektrický bod = pH, při kterém má protein nulový sumární náboj.

Protein pI is calculated using pK values of amino acids described in Bjellqvist et al., which were defined by examining polypeptide migration between pH 4.5 to 7.3 in an immobilised pH gradient gel environment with 9.2M and 9.8M urea at 15i% or 25i%. Prediction of protein pI for highly basic proteins is yet to be studied and it is possible that current Compute pI/Mw predictions may not be adequate for this purpose.



ÚKOL 2

Vyhledejte na ExPASy predikční nástroje pro predikci posttranslačních modifikací proteinů.

ÚKOL 3

U následujících hypotetických savčích proteinů predikujte možná místa fosforylace a c-mannosylace. Které aminokyseliny jsou při těchto procesech modifikovány?

Protein 1

```
SCLAETQQMVKAERKLCMHVKTCCFYTAFAEVRYTDQYPRGMCTDHEKSNEQEQTFRSHHAFMTHEHMANSFGL  
VTQQCELRSFDTPKFYVLLACNKKFQAAPPQQVGCICLDYMYIFETIGGPVNIIVIKIDHLTDYMSGKSLKPARY  
GDEMRNPMNCPNERSGVPGSMNNYSGDFMRNFNISDQIALIKHYDVYCHLPVR
```

Protein 2

```
LFFWVGWKPIKIQQPYWMHNIGMLWNVVILGVPFCNPWEELEMAVCHHEWERHNVNGCKWLYPFQKVMGKNLGR  
PNVYQHHQDHAGPNIVRMGMEFYQNFLHDAIFCYKANGKAGPQWEDYLVCHDKNIFAFWPCYQGRKFDEWCMVQL  
WDCIEKPAAMCYVRDPNKIEVLRDKGEARKLLPMMICYNDQIDPWNVYIFLHVPMQYEFDRRAKQYWDEMQACRY  
IVIDDCCRHEMMLAFQCMNHRICYFGQAKHREHGRFA
```

ÚKOL 4

Pomocí programu **ProtParam** (<http://web.expasy.org/protparam/>) určete základní fyzikálně-chemické parametry následujícího proteinu.

```
HLGYKRWRWSDLFDNKSTALVVARCRIAQAPYDHCINPETRYMMRHWMKCHCAWNECGGRHFENMNAICAWCDFG
LLSTESMVKSFYIRTQPESCSWPYIHTCPLEHSLVKRNLI PYFEHTKGWYEATAHVACIFDEHIDGRWNQISRQG
WWYLPNMNCWNMFYLI GYIQMGQDIRHCHKDHQGVFLRFFDKQHFLQVDNMAFKHTNNCVYPWKIRQNPEWLDLDC
PNPPGYVDWVCMYVIPQMVEVTSCSINKETWFEIPEYWEFTTKWPGNTYTLVFKGYGADKTSKRQDTMMGQLDGR
PSKAMYSCGMDLSHSAHAQVIPMTNEWSEQLVYFKS IMVDGRMAFRQADQFCQLTHAEKV
```

ÚKOL 5

Pomocí programu **GPMaw** (http://www.alphalyse.com/gpmaw_lite.html) určete základní fyzikálně-chemické parametry následujícího proteinu.

```
KIGEDNTQECMCSPLHSNGGSEYLVAGGKAKPAGKLAQHWGQRILGTQRTSAVESGVLAYARATSAGEKTRQWQR
IANSRLIVDKNPNDVAKTKRSYTI LILKVN RDEQYIPDATVLVADGTFILGDNLVIEKLT EFPALNPF SFHRDAR
GESQEEVEGLVKMMPDP SHGLLNLT VVATS YVIIMFSLEAVSRIMLFAYASPLTLKLDEFKMNPGKEYDIWVQEE
PFDFLQVHDSAIHRRRIGPLC
```

ÚKOL 6

Porovnejte teoretickou stabilitu následujících proteinů.

Protein 1

```
LVIVDAVTLLSAYPEASRDPAAPTVIDGRHLYVVSPGDAAQLGHNDSRLFTGLSPGDQLHLRETALALRAEVSVL
FIRFALKDAGIVAPIELEVRDAATAVPDADDLLHPSRPLKDHYWRSVDVLAAGATTCTADFAVCDRDTVSGYFR
WETSIEIAGSQPDTKQPGFKPSSDRNGNFSLPNTAFKAI FYANAADRQDLKLFIDDAPEPAATFVGNSEDGVRL
FTLNSKGGKIRIEASANGRQSATDARLAPLSAGDTVWLGWLGAEADGADADYNDGIVILQWPIT
```

Protein 2

```
DRNGNFSLPNTAFKAI FYANAADRQDLKLFIDDAPEPAATFVGNSEDGVRLFTLNSKGGKIRIEASANGRQSAT
DARLAPLSAGDTVWLGWLGAEADGADADYNDGIVILQWPIT
```

Protein 3

```
LVIVDAVTLLSAYPEASRDPAAPTVIDGRHLYVVSPGDAAQLGHNDSRLFTGLSPGDQLHLRETALALRAEVSVL
FIRFALKDAGIVAPIELEVRDAATAVPDADDLLHPSRPLKDHYWRSVDVLAAGATTCTADFAVCDRDTVSGYFR
WETSIEIAGSQPDTKQPGFKPSS
```

ÚKOL 7

Porovnejte teoretický extinkční koeficient následujících proteinů.

Protein 1

```
KTDYWTHMWEEMIEHQDWQPCMVIIWMFDWDVYACWWLHIKRWGYLNHLKHARSQIQHVETRSLAMPPTVDRGDCN
FNSNVQEAWKAKKKNYCGWEQYWPSTCGIAGDFSFNLYLWGYACWKQIGPPESWAFSWLTYQFNYPNTFFIMHRK
MLITWLEMSFVWCRHNWVVGSRPECR
```

Protein 2

```
HHIAINGGLFRRTNNACITCTFTCTGNFQFLDRRLSGQIACRQRFNAQVALRRRFHTFQAFRNTRHEEKQHGNA
MQIIPQCTTHLHAFNREGHATFHAGKKNIHNAKHRNFQNMNLGQKQTAQHTPCHGGQCLFRCEKNCAAGFLSGFC
LEFCAKHHEFHFFLFFNGCKNKGEIIFRKFINPQTGIQGCILLIPSHIGLENFAFNLLGAIDGLTFMCQNHQQL
QHNHFNLMCNGRKCLLGRSDCRLGNFNFTGQVGLAGLGRALGHQTQLFTRRDTGKETRDNLTTAKETAHAGAL
HTIRRQFKINLRQEKENHHQAFTHAENQEHGTIGFTLIGITQQEFNNGRGTQVQHFQGFALQNLHLKIRMINFCRN
QAHQRNTKLGDFEVCAANDQHANPAI LALFQQGIMTRHADLTTTFNCHQENKHKQRRQLRHTGEQLRQICQSDIT
MGLIRIIEVRIKARAMNEHTMHFHCLLELRCAARTIGTGRLCKTGMGHDANI IHCATMHAAA IARFTF
```

SAMOSTATNÝ PROJEKT

Pomocí programu ProtParam určete u vašeho proteinu základní fyzikálně-chemické parametry.

Jste rychlí a nudíte se? Nakreslete mi obrázek: <http://prosite.expasy.org/mydomains>

Máte už opravdu všechno hotové? Zareplikujte si na čas:

http://www.nobelprize.org/educational/medicine/dna_double_helix/dnahelix.html

Nudíte se i doma? Složte si třeba horečku dengue:

http://www.rcsb.org/pdb/101/static101.do?p=education_discussion/educational_resources/index.html#Paper-Models