

Blok 4: Terciární a kvartérní struktura proteinů

Úloha 1:

Seznamte se s formátem .pdb. Otevřete v textovém prohlížeči soubor **1R16.pdb** a uveďte:

- O jaký protein se jedná?
- Kdo je autorem struktury?
- Jakou technikou byla struktura získána?
- Kolik atomů obsahuje kompletní struktura (včetně ligandů a solventu)?
- Jaké prvky sekundární struktury obsahuje daný protein?

Úloha 2:

Pokuste se vytvořit model struktury pro zadaný protein pomocí serveru **SWISS-MODEL** (<http://swissmodel.expasy.org/>). Použijte automatický mód.

Sekvence:

```
MYPFDFNPNTNTYATNEDFVCPYFLDYNNNSQDDYKNFRGENYDFEDTEENIENRNIEETEYEGLFRAWNPWNN  
LGGNITSGLGASSWAANRIDLFARGRGGELIHNWFDNGKWNWYENLGGILTSSPKAVSWGFNRIDVVCRTDNAM  
YHKWWDGSSWSGFENLGGQLTSAPTICSWAPNRLDCFARGTDNQLHHKWWDGSSWSQWEALGGSLTSGPGAVSWG  
PNRIDVDFARGRNNTLIHKWNGTSSWSQWEDLGGFLTSAPCASSRGNRIDVDFARGRNRLMYKYWDGSRWSDWTF  
LQGYLTSEPVSVSRNSSSINVFAKGPENVIERIYS
```

Úloha 3:

Pomocí serveru **PDBeFold** (<http://www.ebi.ac.uk/msd-srv/ssm/>) analyzujte N-terminální doménu proteinu BC2L-C. (PDB kód: 2WQ4). Nalezněte proteiny s nejvyšší strukturní homologií k tomuto proteinu.

Úloha 4:

Použijte server **Dali** (http://ekhidna.biocenter.helsinki.fi/dali_server/start) a najděte blízké strukturní homology k některému z proteinů v PDB databázi (<http://pdb.rcsb.org>). Využijte **Dali Database**.

Úloha 5:

Pomocí serveru **Topsan** (<http://www.topsan.org/>) zjistěte, do jaké strukturní rodiny patří protein z *Xanthomonas campestris* (PDB ID: 2qjw) a zda jsou známy nějaké jeho strukturní homology. Pokud možno, porovnejte strukturu 2qjw a nejbližšího homologu.

Úloha 6:

Analyzujte pomocí serveru **PDBePISA** (http://www.ebi.ac.uk/msd-srv/prot_int/pistart.html) lidskou glutarátdehydrogenasu:

- Tvoří lidská glutarátdehydrogenasa oligomer?
- S kolika dalšími molekulami tvoří každá molekula dehydrogenasy stabilní vazbu?

Úloha 7:

Která residua delta-podjednotky DNA polymerasy ze *Saccharomyces cerevisiae* jsou klíčová pro vazbu DNA? Využijte serveru **IBIS** (<http://www.ncbi.nlm.nih.gov/Structure/ibis/ibis.cgi>).

Úloha 8:

Seznamte se se serverem **ProFunc** (EBI, <http://www.ebi.ac.uk/thornton-srv/databases/ProFunc/>) prostřednictvím modelového příkladu předpokládané glutaminasy z *Bacillus subtilis*. Je možná jiná funkce tohoto enzymu? Vycházejte z predikce na základě 3D struktury.