

Cvičení STBI – databáze:

PDBSum

- 1) Zjistěte, jak spolu interagují jednotlivé domény v Na/K – ATPase.
- 2) Který cleft (záhyb) je pravděpodobně aktivním místem cytochromu P450 ve struktuře 2HI4?
- 3) Zjistěte, které aminokyseliny a jak interagují s ligandy ve strukturách cytokininových receptorů. (LIGPLOT)

PDBe

- 1) Porovnejte, jaké informace Vám poskytne PDB a PDBe pro jedno PDBID (např. 2HI4), co má PDBe navíc? (v analýze sekvencí, ligandů, vizualizace struktury)
- 2) Pomocí funkce Wizard zjistěte, co vše se ví o zeatinu – kolik je struktur se zeatinem?
- 3) Pomocí funkce Wizard zjistěte, které proteiny se strukturně nejvíce podobají PDBID 2HI4, případně 3T4T.
- 4) Pomocí funkce Wizard zjistěte, které části proteinu 3T4T mohou být fosforylovány (Motif search)
- 5) Porovnejte, čím se liší vazebná místa pro ATP a ADP pomocí PDBeSite. Vizualizujte JMolem.
- 6) Ke které aminokyselině se nejčastěji váží sodík a draslík?
- 7) Pomocí PDBePisa zjistěte jaká je kvartérní struktura proteinu PDBID 3T4T.
- 8) Jak vypadá kvartérní struktura proteinu 1stm? Z kolika podjednotek je složena?
- 9) Pomocí EMDB si prohlédněte struktury virů. Která struktura viru má nejlepší rozlišení?

CSD

Na volně dostupných vizualizačních stránkách WebCSD, nebo s pomocí programu Mercury (http://www.ccdc.cam.ac.uk/free_services/teaching/) si prohlédněte a analyzujte:

- 1) Jak dlouhé jsou vazby mezi C-C atomy v benzenu (BENZEN02), případně ferrocenu (FEROCE27)
- 2) Které z derivátů cyklooktatraenu jsou aromatické? (ZZZSAE01, TMCOTT, TMOCKE)
- 3) Čím se od sebe liší konformace struktur cyklopentanu (LISLOO, IHIPOE), a cyclohexanu (CYCHEX)
- 4) Jak se liší stereochemie L-(R)- a D-(S)-alaninu (LALNIN23, ALUCAL05)
- 5) Jak se liší struktura, když přidáváme vazebné členy ke rtuti? Hg₂Cl₂ (OKAJOZ), HgCl₃- (KUSMAM), and HgCl₄²⁻ (KEYZUK)

CATH

- 1) Do jaké super rodiny patří následující proteiny?
 - a. Cytochrom P450
 - b. Na/K pumpa
 - c. cytokininový receptor
- 2) Pro protein 1e4f zjistěte, do které super rodiny patří, jak je popsána jeho architektura. Je jeho architektura pravidelná?
- 3) Porovnejte zařazení Cytochromu P450 2E1 dle CATH a dle SCOP.
- 4) Kolik domén najdete ve struktuře Na/K-ATPázy?