*6. Найдите белок с известной пространственной структурой, гомологичный белку, последовательность которого дана. Выбирайте находки 1) сам белок; 2) две находки с покрытием, близким к 100% и идентичностью 30-50%. Посмотрите, чтобы все три белка были из разных вирусов. Внесите в протокол pdb коды этих трех белков, название и из какого вируса.*

*Постройте выравнивание трех последовательностей, сохраните jalview проект, раскраска ClustalX, процент Identity – 100%. В протоколе укажите число и процент консервативных позиций.*

*7. Совместите три структуры и сохраните в одном файле. Используйте сервис MultiProt (<http://bioinfo3d.cs.tau.ac.il/MultiProt/>). Совмещенные структуры оформлены как отдельные модели. По умолчанию, Jmol показывает только первую модель. Чтобы увидеть все, в меню Tools => Animate => All frames. Создайте изображение совмещенных структур в модели backbone 80 (или trace, или cartoon); каждую из структур покрасьте в свой цвет. В протоколе укажите число хорошо совмещаемых C-alpha атомов (сервис сообщает)*

*8 (Не обязательное, но полезное). В белке с известной 3D структурой сравните «структурные домены» и консервативные домены согласно БД Pfam. Заполните табличку:*

|  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- |
|  | *В структуре, на глаз* | *В БД структурных доменов CATH* | *Названия доменов* | *В БД консервативных доменов Pfam* | *Названия доменов* |
| *Число доменов* |  |  |  |  |  |
| *Границы доменов 1й* |  |  |  |  |  |
| *2й* |  |  |  |  |  |
| *3й* |  |  |  |  |  |

*Напишите в протоколе совпадают ли границы доменов CATH и Pfam.
Приведите рисунок структуры, на котором выделены цветом домены.*

*Выберите свой белок или возьмите* любой из: 1C1D, 1dq3(2), 2ijd, 1WER (2), 1TPP(2), 1ZZZ(2).

Визуально определите границы структурных доменов. Для этого изобразите остов одной цепи в виде backbone 80. Раскрасьте по радуге (color group) от N-конца к C-концу. В первом приближении, в том месте остова, в котором разрезание линии приведет к распадению частей в пространстве без существенных зацеплений и находится граница доменов. Для некоторых доменов одного разреза мало, придется сделать два мысленных разрезе цепи. Выделите и раскрасьте домены командами select <фрагмент> (например, select 1-115:A) и color <ваш любимый цвет> (например, color green).

Сегодня есть две основные структурные классификации - SCOPe (structural classification of proteins, extended) и CATH. Адреса веб-ресурсов - www.google.ru. Будем использовать CATH.

Используйте БД PDBsum, в которой есть информация и из CATH, и из Pfam

Если в белке более трех доменов – можно игнорировать четвертый и последующие при выполнении этого задания.