*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 его. Оцените 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*

*8. 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.  
*7. Для одного из доменов из предыдущего задания – найдите его структурных гомологов в банке PDB при помощи программы PDBeFold. Сохраните совмещение двух гомологов и самого домена.***Внимание. Это задание надо выполнять в браузере Mozilla Firefox.**В PDBeFold выберите pairwise, поиск против PDB. В окне query укажите PDB код и в окошке пониже выберите select rang, укажите участок равный домену. Важный параметр для этой программы – минимальный процент совпадающих элементов вторичной структуры (Lowest acceptable match). Если ваш домен составляет только небольшую часть белка, то этот процент может оказаться ниже порога. Следовательно, надо как-то подобрать этот порог так, чтобы уж сам-то этот белок обязательно нашелся. Submit.На странице с результатом выберите двух структурных гомологов (лучше всего с RMSD от 0.5 до 2.5). Постройте совмещение (multiple structural alignment), включая query. Откройте совмещенные структуры с помощью Jmol апплета. Выберите подходящий ракурс и сохраните картинку.