

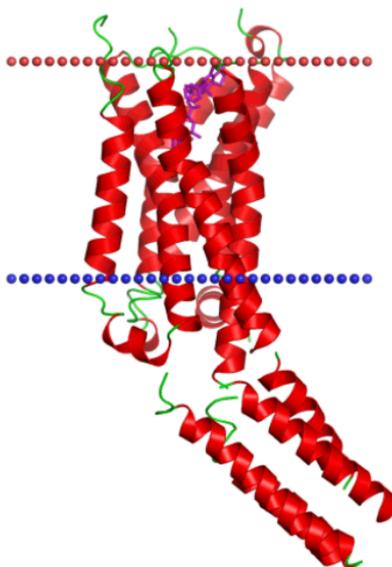
Практикум 7

1. База данных ОРМ

Я выбрал в базе данных ОРМ белок 5-hydroxytryptamine receptor 1B (4iaq) содержащий альфа спирали. Его параметры и структура представлены ниже.

4iaq

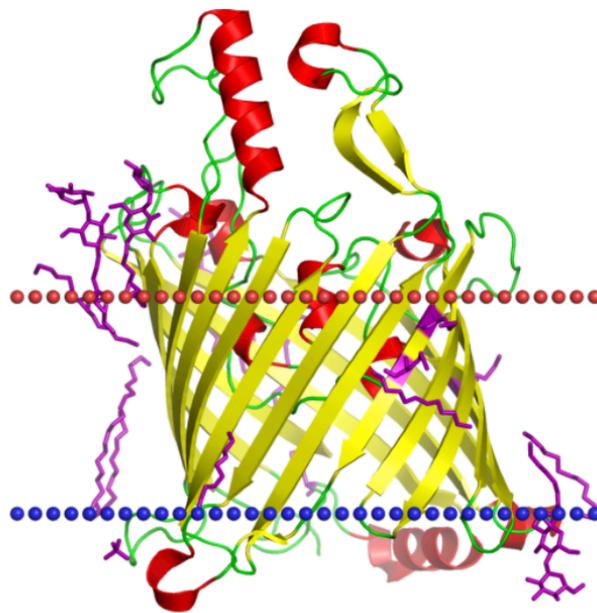
Длина гидрофобной части	34.4
Координаты трансмембранных спиралей	1(46- 72), 2(87- 112), 3(120- 145), 4(166- 184), 5(206- 229), 6(316- 339), 7(349- 371)
Среднее кол-во остатков в спирали	22
Локализация	Внешняя мембрана эукариот



Белок с бетта-бочками это Porin B (4gey)

4gey

Длина гидрофобной части	24.2
Координаты трансмембранных участков	1(28- 38), 2(53- 63), 3(74- 84), 4(114- 125), 5(130-135), 6(176-183), 7(190- 195), 8(219- 228), 9(234- 242),10(275- 284),11(295-303), 12(314- 322),13(333- 338),14(376- 383),15(389- 397),16(411- 419)
Среднее кол-во остатков в участке	6
Локализация	Внешняя мембрана грамм-отрицательных бактерий



2. Анализ предсказания трансмембранных спиралей

```
# 4iaq:A Length: 367
# 4iaq:A Number of predicted TMHs: 7
# 4iaq:A Exp number of AAs in TMHs: 151.8552
# 4iaq:A Exp number, first 60 AAs: 34.58817
# 4iaq:A Total prob of N-in: 0.09734
# 4iaq:A POSSIBLE N-term signal sequence
4iaq:A TMHMM2.0 outside 1 14
4iaq:A TMHMM2.0 TMhelix 15 37
4iaq:A TMHMM2.0 inside 38 48
4iaq:A TMHMM2.0 TMhelix 49 71
4iaq:A TMHMM2.0 outside 72 85
4iaq:A TMHMM2.0 TMhelix 86 108
4iaq:A TMHMM2.0 inside 109 128
4iaq:A TMHMM2.0 TMhelix 129 148
4iaq:A TMHMM2.0 outside 149 162
4iaq:A TMHMM2.0 TMhelix 163 185
4iaq:A TMHMM2.0 inside 186 301
4iaq:A TMHMM2.0 TMhelix 302 324
4iaq:A TMHMM2.0 outside 325 327
4iaq:A TMHMM2.0 TMhelix 328 350
4iaq:A TMHMM2.0 inside 351 367
```

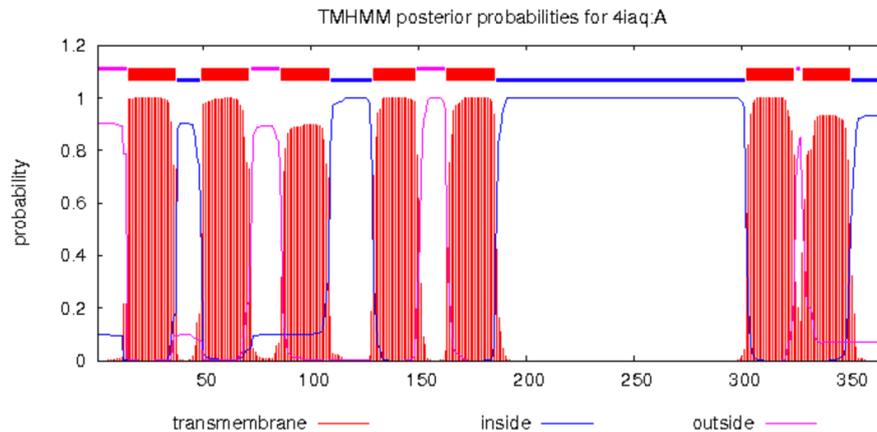


Рисунок 3. Предсказание трансмембранных участков с помощью программы ТМНММ. Синим цветом показаны части белка, находящиеся снаружи мембраны, а розовым, находящиеся внутри. Красные прямоугольники это трансмембранные спирали

ТМНММ смог предсказать 7 трансмембранных спиралей, но ошибся с их координатами в среднем на 10 аминокислот, а так же предсказал несуществующую спираль до первой и не предсказал пятую (206- 229)

ID	4iaq:A			
FT	TOPO_DOM	1	12	NON CYTOPLASMIC.
FT	TRANSMEM	13	37	
FT	TOPO_DOM	38	48	CYTOPLASMIC.
FT	TRANSMEM	49	68	
FT	TOPO_DOM	69	87	NON CYTOPLASMIC.
FT	TRANSMEM	88	108	
FT	TOPO_DOM	109	128	CYTOPLASMIC.
FT	TRANSMEM	129	150	
FT	TOPO_DOM	151	161	NON CYTOPLASMIC.
FT	TRANSMEM	162	185	
FT	TOPO_DOM	186	301	CYTOPLASMIC.
FT	TRANSMEM	302	327	
FT	TOPO_DOM	328	332	NON CYTOPLASMIC.
FT	TRANSMEM	333	352	
FT	TOPO_DOM	353	367	CYTOPLASMIC.
//				

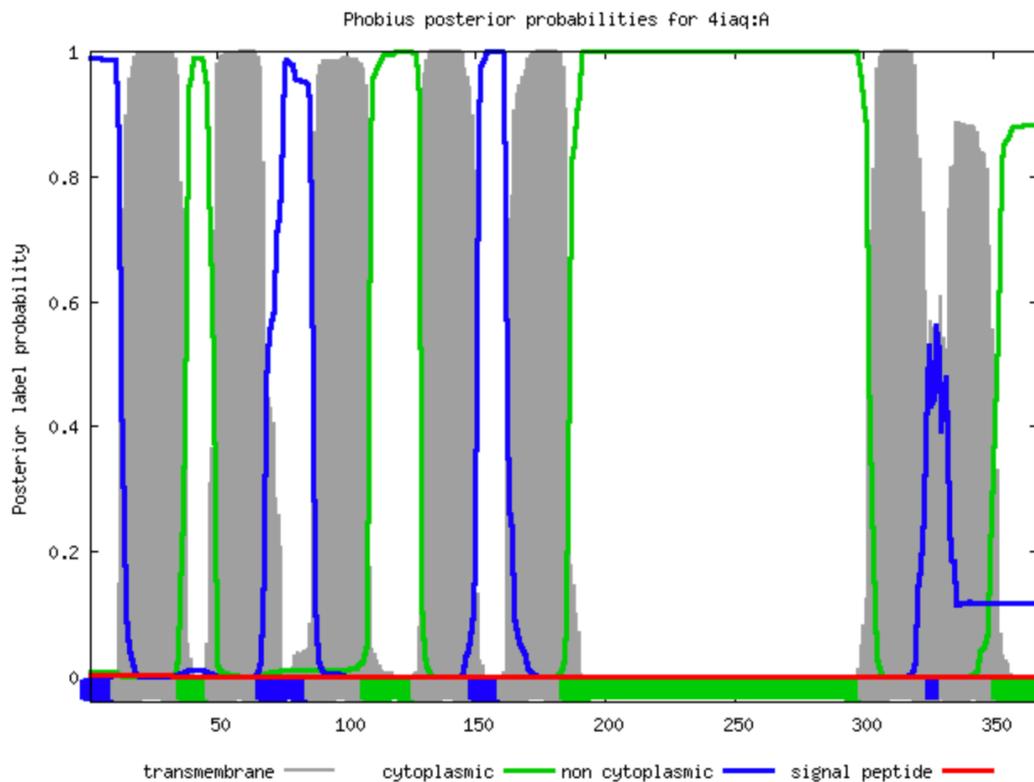


Рисунок 4. Предсказание трансмембранных участков с помощью программы Phobius. Синим цветом показаны части белка, находящиеся снаружи от мембраны, а зеленым, находящиеся в цитоплазме. Красные прямоугольники это трансмембранные спирали

Как и в случае ТМНММ, Phobius предсказал 7 трансмембранных участков, но вместо пятого(206- 229) предсказал лишний участок перед первым(46- 72)

3. База данных TCDB

Для 5-hydroxytryptamine receptor 1B (4iaq):
TCID 9.A.14.3.6

Сведения о белке:

Рецептор 5HT1B связанный с серотониновым G-белком. Были получены кристаллографические структуры этого рецептора, связанного с эрготамином и дегидроэрготамином. Структуры показали, что эти вещества связываются с рецептором похожим образом. А именно занимают ортостерический карман и удлиненный соединительный карман рядом с внеклеточными петлями.

Расшифровка TCID:

9. - Неполностью охарактеризованные транспортные системы

9.A - Распознанные транспортеры с неизвестным биохимическим механизмом

9.A.14 - Рецепторы связанные с G-белком

Второй белок в базе данных обнаружен не был