

C. PDB (protein databank) og Protein Workshop

Formålet med øvelsen er at lære at finde relevant information om et protein gennem dets PDB-side så de rette dele af det kan observeres gennem tredimensionelle visualiseringer i Protein Workshop.

Gå til PDB databasen her: <http://www.pdb.org/pdb/home/home.do>

1. Søg efter proteinet med id 1SMD som gerne skulle være det spytamylase der minder mest om det protein, du har undersøgt hidtil.
 - a. Hvilke oplysninger taler for, at det er det rigtige protein du har fat i?
2. Undersøg nu proteinets 3-D struktur ved hjælp af Protein Workshop.
 - a. Find linket til 'Protein Workshop' under billedet af proteinet til højre på siden. Måske har du brug for at opdatere din version af programmet Java, men det skal du så bare gøre.
 - b. Tag fat med musen i proteinet og drej det rundet. Hvilken form har molekylet? (tertiær struktur).
 - c. Gå ind under 'Shortcuts' og vælg 'chain color ramp' og tryk på knappen 'Enact'. Identificer Den N-terminale og C-terminale del af proteinet.
 - d. Undersøg dets sekundære struktur ved at skifte til 'Conformation Type'. Husk at trykke 'Enact'. Hvor mange α -helixer og hvor mange β -foldeblade? Gå evt. tilbage i PDB under 'Molecular Description' og tjek om dit antal stemmer overens med opgørelsen der.
 - e. Undersøg proteinets polaritetsforhold ved at skifte til 'Hydrophobicity'. Husk at trykke 'Enact'. Passer fordelingen af hydrofile og hydrofobe aminosyrer med at proteinet udskilles i mundhulen?
 - f. Undersøg proteinets aminosyresammensætning ved at skifte til 'By compound'. Husk at trykke 'Enact'. Kom med forslag til hvor der kan være disulfidbindinger. Hvor mange disulfidbindinger vil du foreslå at proteinet har?