



Ekstraopgaver til kapitel 2 –

Proteiner – de molekulære nanomaskiner

Virtuel undersøgelse af proteins 3D-struktur

Proteinstrukturer kan sammen med en række andre informationer findes i databaser, som forskere indrapporterer dem til. Strukturerne kan enten være teoretisk beregnede eller eksperimentelt bestemte.

1. Forklar forskellen på en beregnet model og en eksperimentelt bestemt model. Inddrag boks 2.5.

Denne opgave tager udgangspunkt i enzymet β -galactosidase, som er vist i figur 15b og 26. Man kan dog med samme fremgangsmåde undersøge andre proteiner. Laver du SRP i biologi eller bioteknologi, kan du fx undersøge proteiner, som spiller en rolle i dit projekt, nærmere. Det kan være en måde at inddrage et molekylært niveau i dit projekt.

2. Åben databasen Protein Data Bank (<https://www.rcsb.org/>)

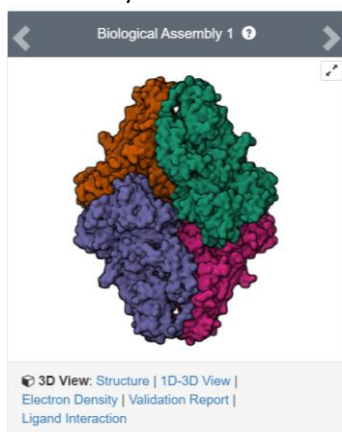
I søgefeltet kan man søge på proteinets navn (på engelsk). Mere sikkert er det dog at anvende proteinets database-ID: PDB-ID. PDB-ID for bogens proteiner er angivet i billedlisten. Søger du andre proteiner kan du som regel finde dem med en googlesøgning, hvor du kombinerer navnet med "PDB".

3. Søg på PDB ID: 1JZ8



4. Klik på enzymets navn. Du kommer nu videre til enzymets side.
5. Undersøg kort hvilke oplysninger du kan finde om enzymet på siden.

Strukturen viser β -galactosidase i kompleks med allolactose. Enzymet omdanner en andel af den lactose, som bindes enzymets aktive site til allolactose, se side 53. Til venstre er der mulighed for at se 3D-strukturen:



6. Klik på 'structure'. Nu kommer proteinets struktur frem i en interaktiv udgave.

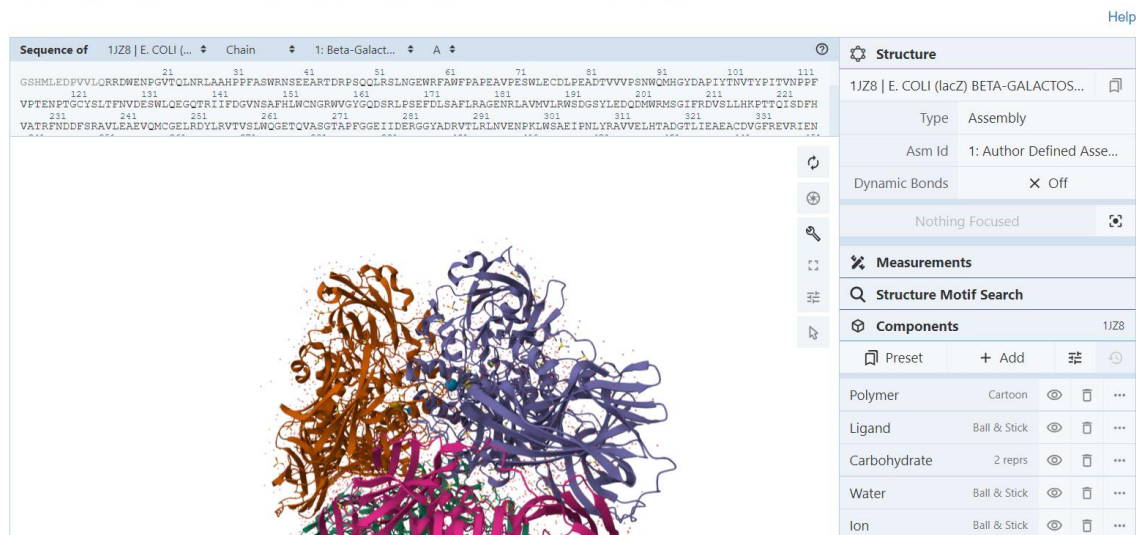


7. Drej proteinet rundt med musen.

Husk fra nu af at tage screenshots af hvad du ser. Sæt dem ind i din journal, og markér der du ser på figuren.

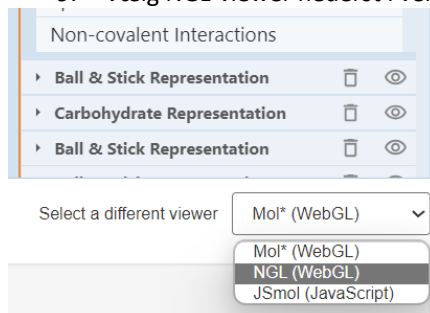
8. Beskriv hvad siden viser om proteinets primærstruktur, sekundærstruktur i proteinet og dets tertier- og kvarternærstruktur. Vær opmærksom på sekvensen øverst:

E. COLI (lacZ) BETA-GALACTOSIDASE (E537Q) IN COMPLEX WITH ALLOLACTOSE



Man kan vælge at arbejde med molekylet i forskellige apps.

9. Vælg NGL-viewer nederst i venstre hjørne:



For oven kan du læse om hvordan du flytter på proteinet med musen. Klik på 'mouse control'.

I menuen til højre kan du redigere i visningen af proteinet. For overskuelighedens skyld kan du fjerne vand og ioner ved at fjerne fluebenet:

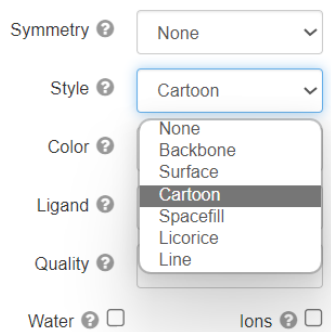
Quality ? Automatic

Water ? ☐ Ions ? ☒

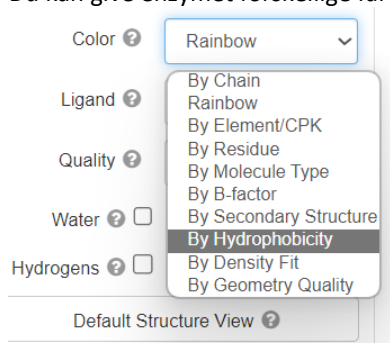
Hydrogens ? ☒ Clashes ? ☐

Default Structure View ?

Du kan vælge forskellige modeller for enzymet. Cartoon er båndmodellen, som du er begyndt med. Spacefill viser den molekulære overflade:



Du kan give enzymet forskellige farver:



10. Båndmodellen kan fx farves efter sekundærstrukturer. Gør dette og identificer α -helixer og β -foldeblade.

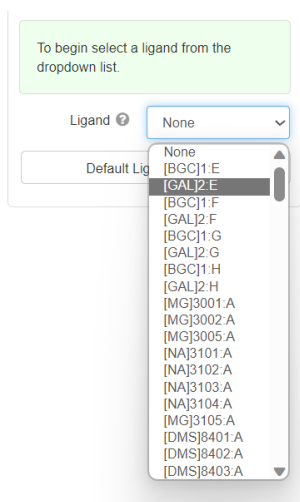
11. Vælg spacefill og farv denne efter hydrophobicitet. Nu vises hvilke aminosyrer der er polære (hydrofile) og upolære (hydrofobe). (Farvevalget er desværre ikke helt ideelt for rød-grøn-farveblinde, men hjælp evt. hinanden.)

By B-factor - colored from red (highest B-factors in the structure) to tan (lowest B-factor in the structure)



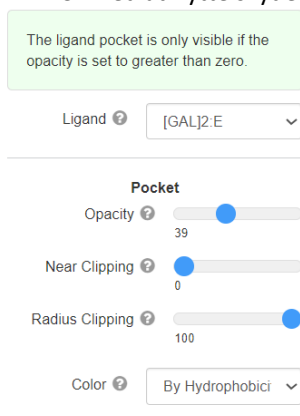
Øverst i menuen til højre kan vælges 'ligand view'. Her kan bindingerne i enzymets aktive site undersøges nærmere.

12. Vælg liganden GAL (galactose).

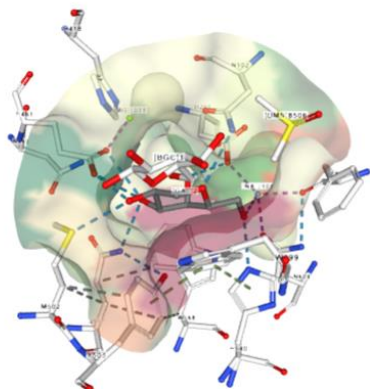


Du kan nu se hvilke aminosyrer i det aktive site der er bundne til carbohydratet. Du kan også se hvilke bindinger der dannes fra aminosyrernes radikaler til substratet.

13. Ved at flytte skyderen for opacitet kan du få proteinets overflade frem:



14. Drej rundt og få en fornemmelse af den grube substratet er bundet i. Hvis farven er hydrofob-hydrofil, kan du desuden få en fornemmelse af polaritetsforholdene i det aktive site:



Prøv nu tilsvarende at undersøge nogle af de øvrige proteiner der optræder i Levende systemer. Husk, du kan finde PDB-ID i billedlisten sidst i bogen. Læs i bogen om de proteiner du undersøger og overvej hvordan deres funktionsmåde kan genkendes i deres struktur.