

Bioinformatyka i biologia obliczeniowa
Laboratorium

Cel ćwiczenia: metody modelowania struktury białek

- 1) Wybierz 2 dowolne białka z bazy .pdb i korzystając wyłącznie z ich struktury pierwszorzędowej zamodeluj:
 - a. strukturę drugorzędową (np. PSI-Pred, Quark, inne). Porównaj model z oryginałem.
 - b. strukturę trzeciorzędową
I-Tasser, Quark z <http://zhanglab.ccmb.med.umich.edu/I-TASSER/>
SwissModel <https://swissmodel.expasy.org/>
Inne, np z <http://www.predictioncenter.org/index.cgi?page=links>
- 2) Znajdź jak najwięcej serwerów modelujących strukturę trzeciorzędową białka i zamodeluj białko z (1).
- 3) Oceń jak dobre są modele, porównując je w PyMolu z rzeczywistą strukturą krystalograficzną. (RMSD można obliczyć w oparciu o opis w sekcji 5 instrukcji: http://ihome.cuhk.edu.hk/~b102142/pymol/pymol_tutorial.html.
Które narzędzie uzyskało najlepszy model i jak jest odległy?
- 4) Za pomocą narzędzi serwisu pdbtm (np. TmDet) wyznacz obszar transmembranowy białka 7ahl.pdb. Sprawdź jaka jest dokładność modelu, porównując ze wskazaniami rzeczywistymi z pdbtm oraz z pdbe.