4. Fehérje

A fehérjék óriás molekulák, amelyeknek egy része az élő szervezetekben végbemenő folyamatokat katalizálják. Egy-egy fehérje aminosavak százaiból épül fel, melyek láncszerűen kapcsolódnak egymáshoz. A természetben a fehérjék fajtája több millió. Minden fehérje húszféle aminosav különböző mennyiségű és sorrendű összekapcsolódásával épül fel.

Az alábbi táblázat tartalmazza az aminosavak legfontosabb adatait, a megnevezéseket és az őket alkotó atomok számát (az aminosavak mindegyike tartalmaz szenet, hidrogént, oxigént és nitrogént, néhányban kén is van):

| Neve | Rövidítés | Betűjele | С | Н | О | N | S | |
|---------------|-----------|----------|----|----|---|---|---|--|
| Glicin | Gly | G | 2 | 5 | 2 | 1 | 0 | |
| Alanin | Ala | A | 3 | 7 | 2 | 1 | 0 | |
| Arginin | Arg | R | 6 | 14 | 2 | 4 | 0 | |
| Fenilalanin | Phe | F | 9 | 11 | 2 | 1 | 0 | |
| Cisztein | Cys | C | 3 | 7 | 2 | 1 | 1 | |
| Triptofán | Trp | W | 11 | 12 | 2 | 2 | 0 | |
| Valin | Val | V | 5 | 11 | 2 | 1 | 0 | |
| Leucin | Leu | L | 6 | 13 | 2 | 1 | 0 | |
| Izoleucin | Ile | I | 6 | 13 | 2 | 1 | 0 | |
| Metionin | Met | M | 5 | 11 | 2 | 1 | 1 | |
| Prolin | Pro | P | 5 | 9 | 2 | 1 | 0 | |
| Szerin | Ser | S | 3 | 7 | 3 | | 0 | |
| Treonin | Thr | T | 4 | 9 | 3 | 1 | 0 | |
| Aszparagin | Asn | N | 4 | 8 | 3 | 2 | 0 | |
| Glutamin | Gln | Q | 5 | 10 | 3 | 2 | | |
| Tirozin | Tyr | Y | 9 | 11 | 3 | 1 | 0 | |
| Hisztidin | His | Н | 6 | 9 | 2 | 3 | 0 | |
| Lizin | Lys | K | 6 | 14 | 2 | 2 | | |
| Aszparaginsav | Asp | D | 4 | 7 | 4 | 1 | 0 | |
| Glutaminsav | Glu | Е | 5 | 9 | 4 | 1 | 0 | |

Készítsen programot feherje néven, ami megoldja a következő feladatokat! Ügyeljen arra, hogy a program forráskódját a megadott helyre mentse!

1. Töltse be az aminosav. txt fájlból az aminosavak adatait! A fájlban minden adat külön sorban található, a fájl az aminosavak nevét nem tartalmazza. Ha az adatbetöltés nem sikerül, vegye fel a fenti táblázat alapján állandóként az első öt adatsort, és azzal dolgozzon!

Az első néhány adat:

| Informatika — emelt szint | | Azonosító jel: | | | | | | | | |
|---------------------------|-----------------------------|-------------------------|------|------|------|-----|-----|--------|-----|--|
| <u> </u> | Határazza mag az aminagayak | ralatív malakulatömagát | ho o | azáı | 2 of | omt | äma | 12 | o h | |

2. Határozza meg az aminosavak relatív molekulatömegét, ha a szén atomtömege 12, a hidrogéné 1, az oxigéné 16, a nitrogéné 14 és a kén atomtömege 32! Például a Glicin esetén a relatív molekulatömeg 2·12 + 5·1 + 2·16 + 1·14 + 0·32 = 75.

A következő feladatok eredményeit írja képernyőre, illetve az eredmeny. txt fájlba! A kiírást a feladat sorszámának feltüntetésével kezdje (például: 4. feladat)!

- 3. Rendezze növekvő sorrendbe az aminosavakat a relatív molekulatömeg szerint! Írja ki a képernyőre és az eredmeny. txt fájlba az aminosavak hárombetűs azonosítóját és a molekulatömeget! Az azonosítót és hozzátartozó molekulatömeget egy sorba, szóközzel elválasztva írja ki!
- 4. A bsa. txt a BSA nevű fehérje aminosav sorrendjét tartalmazza egybetűs jelöléssel. (A fehérjelánc legfeljebb 1000 aminosavat tartalmaz.) Határozza meg a fehérje összegképletét (azaz a C, H, O, N és S számát)! A meghatározásánál vegye figyelembe, hogy az aminosavak összekapcsolódása során minden kapcsolat létrejöttekor egy vízmolekula (H₂O) lép ki! Az összegképletet a képernyőre és az eredmeny. txt fájlba az alábbi formában írja ki:

Például: C 16321 H 34324 O 4234 N 8210 S 2231

(Amennyiben a bsa.txt beolvasása sikertelen, helyette tárolja a G,A,R,F,C betűjeleket tízszer egymás után és a feladatokat erre a "láncra" oldja meg!)

- 5. A fehérjék szekvencia szerkezetét hasításos eljárással határozzák meg. Egyes enzimek bizonyos aminosavak után kettéhasítják a fehérjemolekulát. Például a Kimotripszin enzim a Tirozin (Y), Fenilalanin (W) és a Triptofán (F) után hasít. Határozza meg, és írja ki képernyőre a Kimotripszin enzimmel széthasított BSA lánc leghosszabb darabjának hosszát és az eredeti láncban elfoglalt helyét (első és utolsó aminosavának sorszámát)! A kiíráskor nevezze meg a kiírt adatot, például: "kezdet helye:"!
- 6. Egy másik enzim (a Factor XI) az Arginin (R) után hasít, de csak akkor, ha Alinin (A) vagy Valin (V) követi. Határozza meg, hogy a hasítás során keletkező első fehérjelánc részletben hány Cisztein (C) található! A választ teljes mondatba illesztve írja ki a képernyőre!

45 pont