

Άσκηση 4 (συνέχεια των ερωτημάτων της Άσκησης 3)

- 1) Επιλέξτε 2 δομικά ομόλογες πρωτεΐνες της 1CTN.pdb με το υψηλότερο matching score.
- 2) Ταυτοποιείτε ποιές είναι οι περιοχές που ανήκουν στο TIM BARREL σε κάθε μία από τις πρωτεΐνες. Π.χ. στο COOT φαίνεται μια περιοχή (domain) η οποία δεν ανήκει στο TIM barrel, δείτε manually: click on the residues, πείτε τι πρέπει να μείνει εκτός βαρελιού).
- 3) Μεταφέρετε τις δομές αυτές στο ίδιο σύστημα αναφοράς (superposition) υπολογίζοντας το τελικό RMSD, χρησιμοποιώντας είτε το COOT είτε το CCP4, για το TIM BARREL που ταυτοποιήσατε στο (2), με:
 - a. όλα τα άτομα,
 - b. τα άτομα της κύριας αλυσίδας,
 - c. τα Cα άτομα.
- 4) Να απεικονισθούν οι δομές αυτές με χρήση προγράμματος μοριακών γραφικών (π.χ. COOT, PYMOL) και παραθέστε τις ομοιότητες / διαφορές ως προς τα δευτεροταγή στοιχεία που είναι συντηρημένα ή μη. Π.χ., πού παρουσιάζονται οι μεγαλύτερες αλλαγές, στο πάνω ή στο κάτω μέρος του βαρελιού, στο στόμιο στους β-κλώνους, ή στις έλικες?
- 5) Να καταγραφεί / υπολογισθεί ένας από τους παρακάτω geometry descriptors, για κάθε βαρέλι, και κατά πόσο αυτά τα descriptors διατηρούνται μεταξύ των 2 βαρελιών:
 - a. Διαστάσεις του TIM BARREL (όγκος, ύψος).
 - b. Αποστάσεις (σε Å) μεταξύ α-ελίκων και β-κλώνων (α-helices and β-strands).
 - c. Σημεία όπου ενώνεται κάθε α-ελικα και β-κλώνος στο στόμιο του βαρελιού.

Άσκηση 5 - Bonus (Intervor)

The questions require some understanding of Intervor's interface model, and also the output of "intervor --help":

1. State 3 benefits of the interface model implemented by Intervor over the classical interface model based upon the buried surface area, and the associated dissection of atoms as core - rim.
2. Intervor accommodates water molecules, and allows filtering them by temperature factors. Upon filtering out selected water molecules, describe the changes that may be observed in the AB interface and the AW-BW interfaces.
3. Using Intervor, how can one accommodate alternate locations of atoms, if any in the PDB file?

Ημερομηνία παράδοσης: Τετάρτη 22 Μαΐου στις 23:59
(upload in eclass)