

Άσκηση 2.

1. Εύρεση των δομικά ομολόγων (structural homologues) του ενζύμου με κωδικό PDB code: 1CTN.

Χρησιμοποιήστε είτε το PDBeFold.

<http://www.ebi.ac.uk/msd-srv/ssm/ssmstart.html>

http://www.ebi.ac.uk/msd-srv/ssm/comparisons/cmp_index.html

http://www.ebi.ac.uk/pdbe/docs/Tutorials/workshop_tutorials/PDBefold.pdf

είτε το DALI server http://ekhidna.biocenter.helsinki.fi/dali_server/

ή συνδυασμό αυτών των εργαλείων.

Καταγράψτε τη διαδικασία που ακολουθήσατε καθώς και τις παραμέτρους αναζήτησης.

2. Επιλέξτε τις 5 πρώτες και 5 τελευταίες (διαφορετικές) δομές που έχουν το υψηλότερο και χαμηλότερο score αντίστοιχα ως δομικά ομόλογα.
 - a. Μεταφορά των δομών αυτών στο ίδιο στο ίδιο σύστημα αναφοράς (superposition). Περιγράψτε τα βήματα – εργαλεία που θα χρησιμοποιήσετε
 - b. Φτιάξτε μια εικόνα που να παρουσιάζει τα superimposed 3D structures με ένα πρόγραμμα μοριακών γραφικών.

Βαθμολογία

Ερώτημα 1: 5

Ερώτημα 2α: 3

Ερώτημα 2β: 2

Ημερομηνία παράδοσης: Τρίτη 16 Απριλίου
(upload in eclass)