



Biofizika jegyzőkönyv

Fehérje szerkezeti adatbázisok használata

8. gyakorlat – 2014. 04. 02.

Készítette:

Ancza Fruzsina
(I9U9A8)

Gyakorlatvezető:

Hegedűs Tamás

Budapest

2014

1. **SZAKIRODALOM: adatbázisok, eszközök**

MEDLINE®/PubMed®:

<http://www.ncbi.nlm.nih.gov/pubmed/>

Data Element (Field) Descriptions:

<http://www.nlm.nih.gov/bsd/mms/medlineelements.html>

PubMed Help:

<http://www.ncbi.nlm.nih.gov/books/NBK3830/>

MyNCBI:

<http://www.ncbi.nlm.nih.gov/sites/myncbi>

PubCrawler:

<http://pubcrawler.gen.tcd.ie/>

Intézeti könyvtárak, IP alapú azonosítás, virtuális network, stb.

Kapcsolódó feladat:

Összetett keresés saját vezetéknevre tetszőleges témában és időtartományban.

1900-ig visszamenőleg nincsen az adatbázisban Ancza néven publikált cikk. (1. ábra)



1. ábra

2. **SZEKVENCIA: adatbázisok, eszközök**

NCBI:

<http://www.ncbi.nlm.nih.gov>

<http://www.ebi.ac.uk/services>

UniProt:

www.UniProt.org

Keresési lehetőségek:

- Advanced search → cftr AND organism:human
- cftr AND (organism:human OR organism:mouse)
- cftr_human OR mrp1_human

Szekvenciaillesztés: select, majd alul: align

Kapcsolódó feladatok:

Adott fehérje (**humán ABCG2**) vizsgálata, összehasonlítása a humán CFTR fehérjével szekvenciaillesztéssel, valamint rendezetlen régiók keresése (iupred.enzim.hu).

A CFTR fehérje több módosított (foszforilált) aminosavat tartalmaz a 7-800. aminosavak által alkotott szakaszon →regulátor régió (2. ábra)

Amino acid modifications					
<input type="checkbox"/>	Modified residue	291	1	Phosphothreonine (Ref.19)	
<input type="checkbox"/>	Modified residue	549	1	Phosphoserine (Ref.19)	
<input type="checkbox"/>	Modified residue	660	1	Phosphoserine; by PKA (Ref.6) (Ref.8) (Ref.22)	
<input type="checkbox"/>	Modified residue	686	1	Phosphoserine; by PKC (Ref.6) (Ref.22)	
<input type="checkbox"/>	Modified residue	700	1	Phosphoserine; by PKA (Ref.6) (Ref.8) (Ref.22)	
<input type="checkbox"/>	Modified residue	712	1	Phosphoserine; by PKA (Ref.8) (Ref.22)	
<input type="checkbox"/>	Modified residue	717	1	Phosphothreonine (Ref.22)	
<input type="checkbox"/>	Modified residue	737	1	Phosphoserine; by PKA (Ref.6) (Ref.8) (Ref.22)	
<input type="checkbox"/>	Modified residue	753	1	Phosphoserine; by PKA (Ref.8)	
<input type="checkbox"/>	Modified residue	768	1	Phosphoserine; by PKA (Ref.6) (Ref.8)	
<input type="checkbox"/>	Modified residue	790	1	Phosphoserine; by PKC (Ref.6)	
<input type="checkbox"/>	Modified residue	795	1	Phosphoserine; by PKA (Ref.6) (Ref.8) (Ref.22)	
<input type="checkbox"/>	Modified residue	813	1	Phosphoserine; by PKA (Ref.6) (Ref.8)	
<input type="checkbox"/>	Modified residue	1444	1	Phosphoserine (Ref.22)	
<input type="checkbox"/>	Modified residue	1456	1	Phosphoserine (Ref.22)	
<input type="checkbox"/>	Lipidation	524	1	S-palmitoyl cysteine (Ref.22)	
<input type="checkbox"/>	Lipidation	1395	1	S-palmitoyl cysteine (Ref.22)	
<input type="checkbox"/>	Glycosylation	894	1	N-linked (GlcNAc...) (Ref.7)	
<input type="checkbox"/>	Glycosylation	900	1	N-linked (GlcNAc...) (Ref.7)	
<input type="checkbox"/>	Cross-link	688		Glycyl lysine isopeptide (Lys-Gly) (interchain with G-Cter in ubiquitin) (Ref.22)	

2. ábra

Az ABCG2 fehérje a CFTR-rel ellentétben nem tartalmaz foszforilált aminosavakat. (3. ábra)

Amino acid modifications					
<input type="checkbox"/>	Glycosylation	596	1	N-linked (GlcNAc...) (Ref.17)	
<input type="checkbox"/>	Disulfide bond	592 ↔ 608		(Ref.20)	
<input type="checkbox"/>	Disulfide bond	603		Interchain (Ref.20)	

3. ábra

A szekvenciaillesztéshez összetett kereséssel kikerestem és kijelöltem a két fehérjét. (4. ábra)

The screenshot shows a UniProt search interface. The search query is: `((name:cfr AND organism:"Homo sapiens (Human) [9606]")) OR abcg2 AND organism:"Homo sapiens (Human) [9606]"`. The results table lists 19 entries, with 2 selected: P13569 (CFTR_HUMAN) and Q9UNQ0 (ABCG2_HUMAN). The table columns include Entry, Entry name, Status, Protein names, Gene names, Organism, and Length.

Entry	Entry name	Status	Protein names	Gene names	Organism	Length
<input checked="" type="checkbox"/>	Q9UNQ0	★	ATP-binding cassette sub-family G member 2	ABCG2 ABCP BCRP BCRP1 MXR	Homo sapiens (Human)	655
<input type="checkbox"/>	I7JB59	★	ABCG2 protein	ABCG2	Homo sapiens (Human)	655
<input type="checkbox"/>	F8S0F2	★	Multi drug resistance efflux transport ATP-bi...	ABCG2	Homo sapiens (Human)	112
<input type="checkbox"/>	H0YAF1	★	ATP-binding cassette sub-family G member 2	ABCG2	Homo sapiens (Human)	150
<input type="checkbox"/>	H0YAF3	★	ATP-binding cassette sub-family G member 2	ABCG2	Homo sapiens (Human)	130
<input type="checkbox"/>	Q8WZ76	★	Breast cancer resistance protein	ABCG2	Homo sapiens (Human)	103
<input checked="" type="checkbox"/>	P13569	★	Cystic fibrosis transmembrane conductance reg...	CFTR ABCC7	Homo sapiens (Human)	1,480
<input type="checkbox"/>	Q9HD26	★	Golgi-associated PDZ and coiled-coil motif-co...	GOPC CAL FIG	Homo sapiens (Human)	462

4. ábra

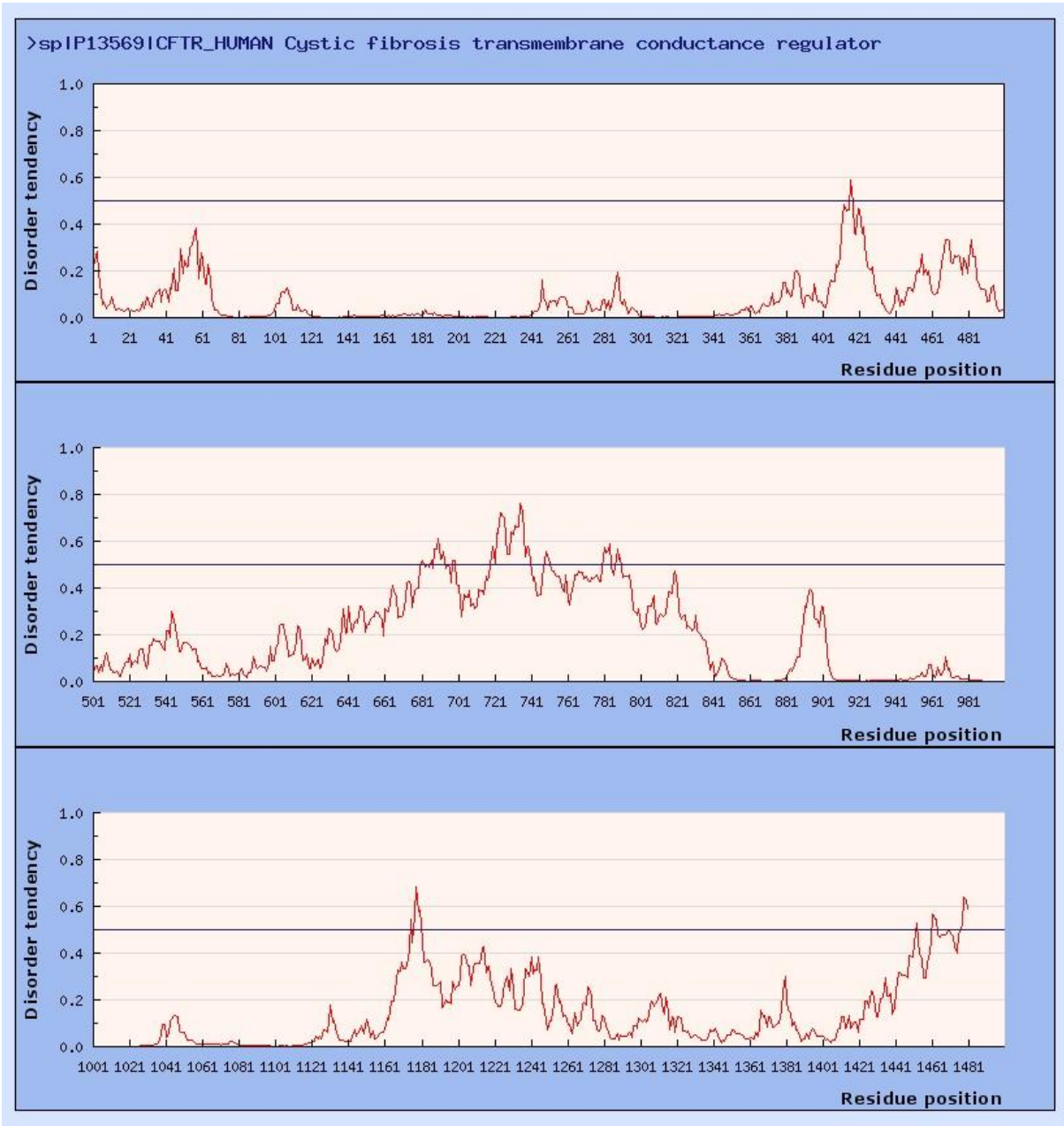
Az illesztésnél azt a szakaszt vizsgáltam, ahol a CFTR regulátor régiója lehet. (5. ábra) Jól látható, hogy kevés hasonló (:) és még kevesebb egyező (*) aminosav van ebben a tartományban. Annál több azonban a gap, amiből arra lehet következtetni, hogy a két fehérje szerkezete és funkciója is jelentősen különbözik.

The screenshot shows a sequence alignment between CFTR_HUMAN (P13569) and ABCG2_HUMAN (Q9UNQ0). The alignment is displayed in a table format with columns for residue number, sequence, and protein name. A red box highlights a region from residue 685 to 325, showing a high degree of sequence divergence with many gaps and mismatches.

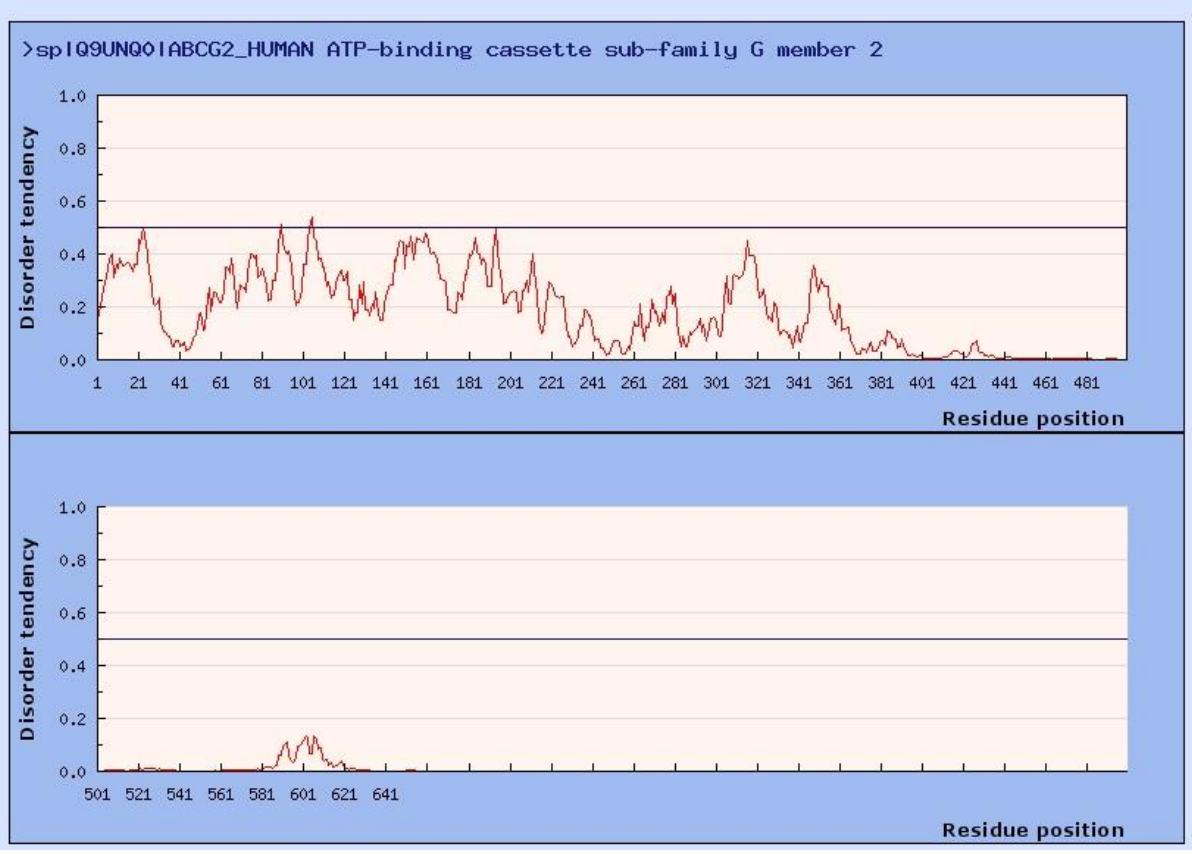
Residue	CFTR_HUMAN (P13569)	ABCG2_HUMAN (Q9UNQ0)
685	QSFKQIGFEGEKRKNSILNPIINSIRKFSIVQKTPLQMGIEEDSDEPLERRLSLVDPSEQ	EDFKATE-----IIE-----PSKQ
745	GEAILPRISVISTGPTLQARRRQSVLNLMTHSVNGQNIHRKTTASTRKVSLAPQANLTE	DKPLIEKLAIEIYVNSSFYKETKAE----LHQLSGGEKKK-----

5. ábra

A rendezetlenség jóslására az iupred.enzim.hu oldalon található adatbázis a kölcsönhatási energiák becslését alkalmazza. A CFTR fehérje esetében azon a szakaszon, ahol a regulátor régió található, nagymértékű rendezetlenség figyelhető meg („disorder tendency” > 0,5). (6. ábra) Ugyanakkor az ABCG2 fehérjénél nem láthatók rendezetlen szakaszok (7. ábra)



6. ábra



7. ábra