

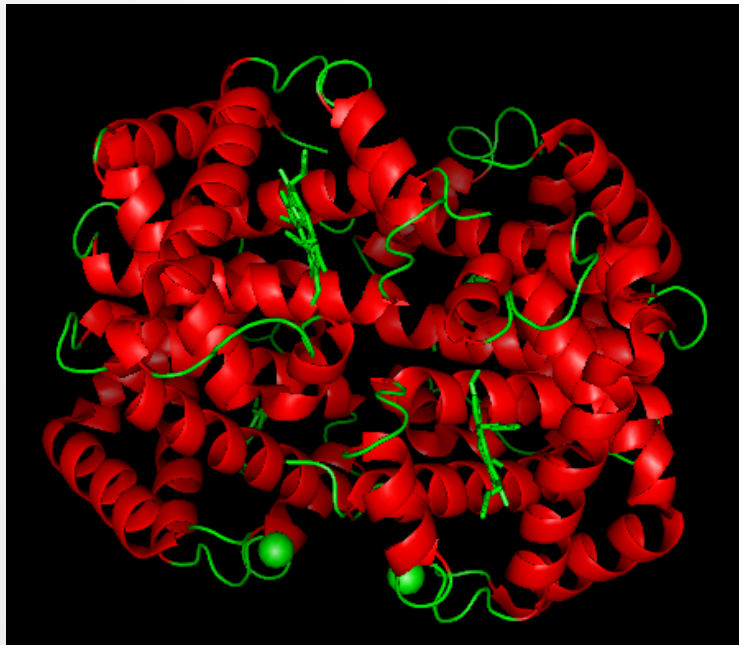
# BIOINFORMATICĂ APLICATĂ ÎN BIOLOGIA STRUCTURALĂ

## Seminar III

### Molecule non-proteice din structura proteinelor

# Identificarea grupărilor non-proteice într-o structură 3D

1. Din zona cu meniuri se apasă **File**, apoi **Open...**
2. Se selectează calea către fișierul dorit:  
**Desktop/BABS\_yyyy/2hhb.pdb**
3. Ascundeți moleculele de apă legată  
**H>Wire>nonbonded**

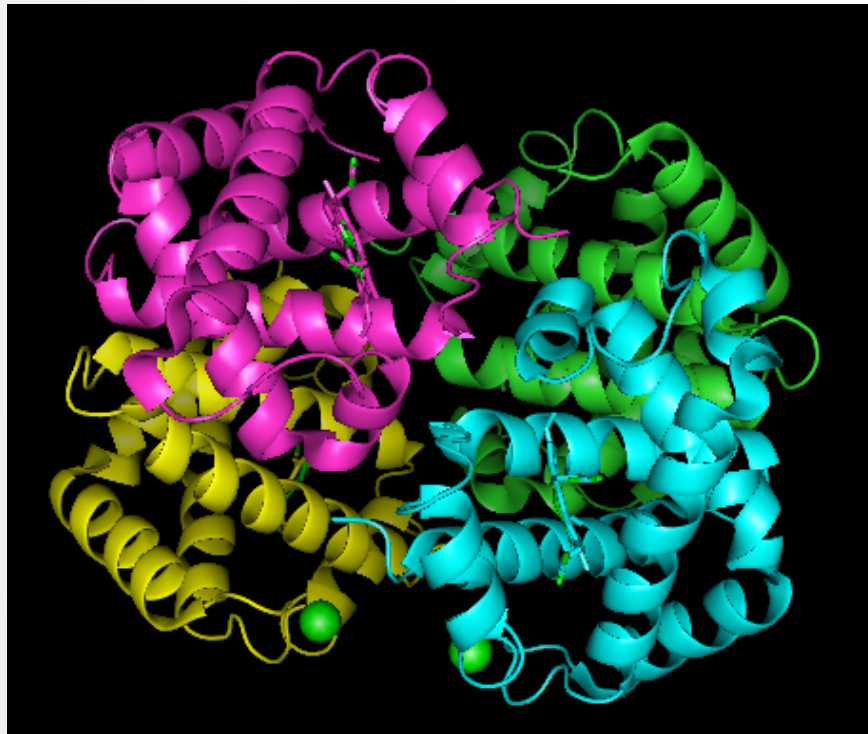


4. Colorați molecula funcție de structurile secundare

Ce structuri secundare se pot observa?

# Identificarea grupărilor non-proteice într-o structură 3D

## 5. Colorați proteina vizualizată funcție de catenele polipeptidice componente

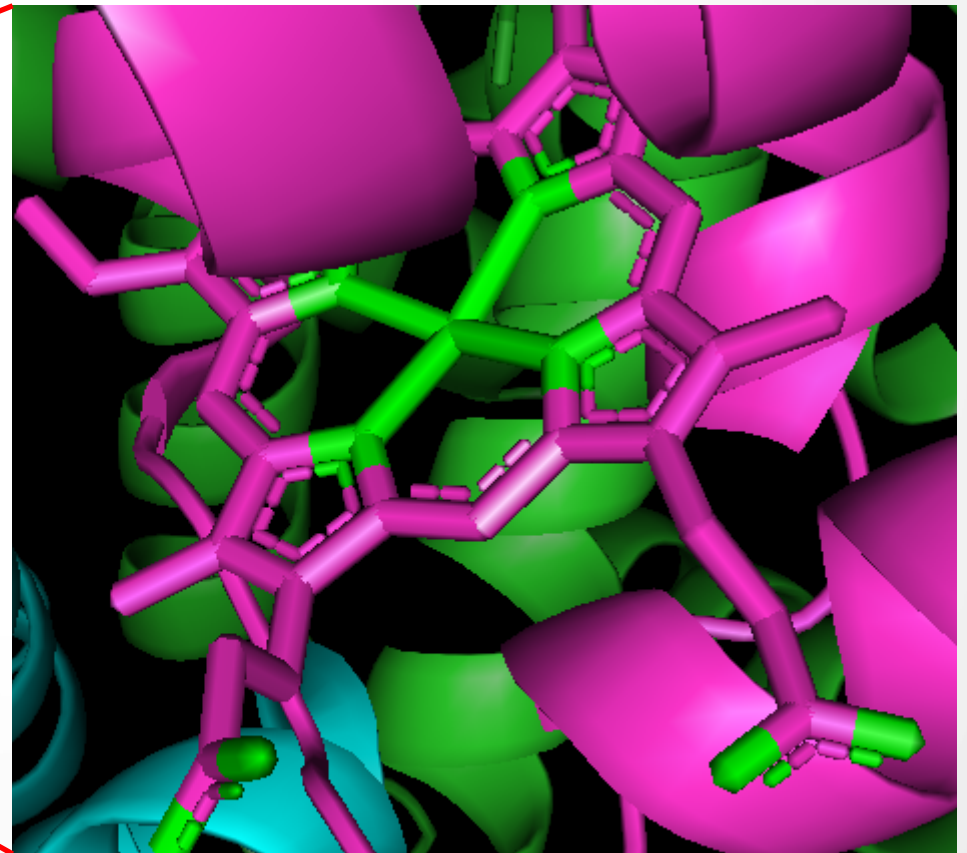
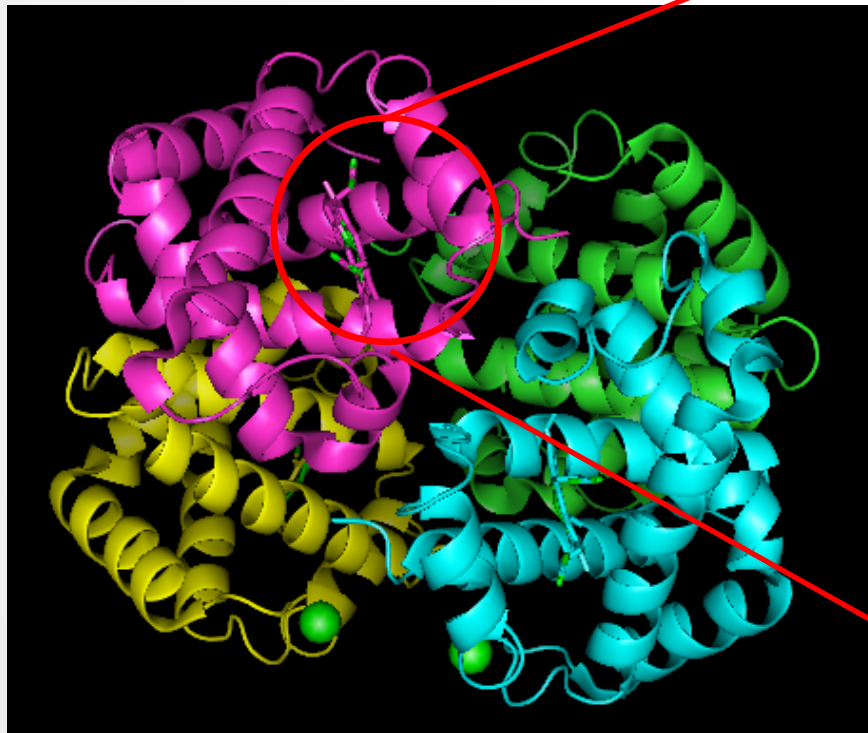


Câte catene polipeptidice conține molecula afișată?

Proteina este monomeră, dimeră, trimeră, tetrameră sau pentameră?

# Identificarea grupărilor non-proteice într-o structură 3D

**6. Este toată molecula afișată sub formă de cartoon? Faceți zoom pe porțiunea afișată ca licorice și mișcați molecula pentru a observa în detaliu structura indicată.**



**Recunoașteți structura chimică de mai sus?**

# Identificarea grupărilor non-proteice într-o structură 3D

7. Ajustați zoom-ul pentru a afișa întreaga moleculă proteică.

8. Pentru a vedea secvența de aminoacizi din molecula proteică afișată alături de toate moleculele non-proteice conținute se accesează meniul **Display>Sequence**

Acest lucru duce la apariția unei noi secțiuni în zona de vizualizare din PyMol

```
/2hbb//A/1 6 11 16 21 26 31 36 41 46 51 56 61 66 71 76 81 86 91 96 101 106 111 116 121  
VLSPADKTNVKAAWGKVGAAHAGEYGAELERMFLSFPTTKTYFPHFDLSHGSAQVKGHGKKVADALTNAVAHVDDMPNALSALSDLHAHKLRVDPVNFKLLSHCLLVTLAAHLPAEFTPAVHI
```

Poziția în catenă

Aminoacizi

În câte culori sunt reprezentați resturile aminoacizi ? De ce ?

Denumirea moleculei afișate

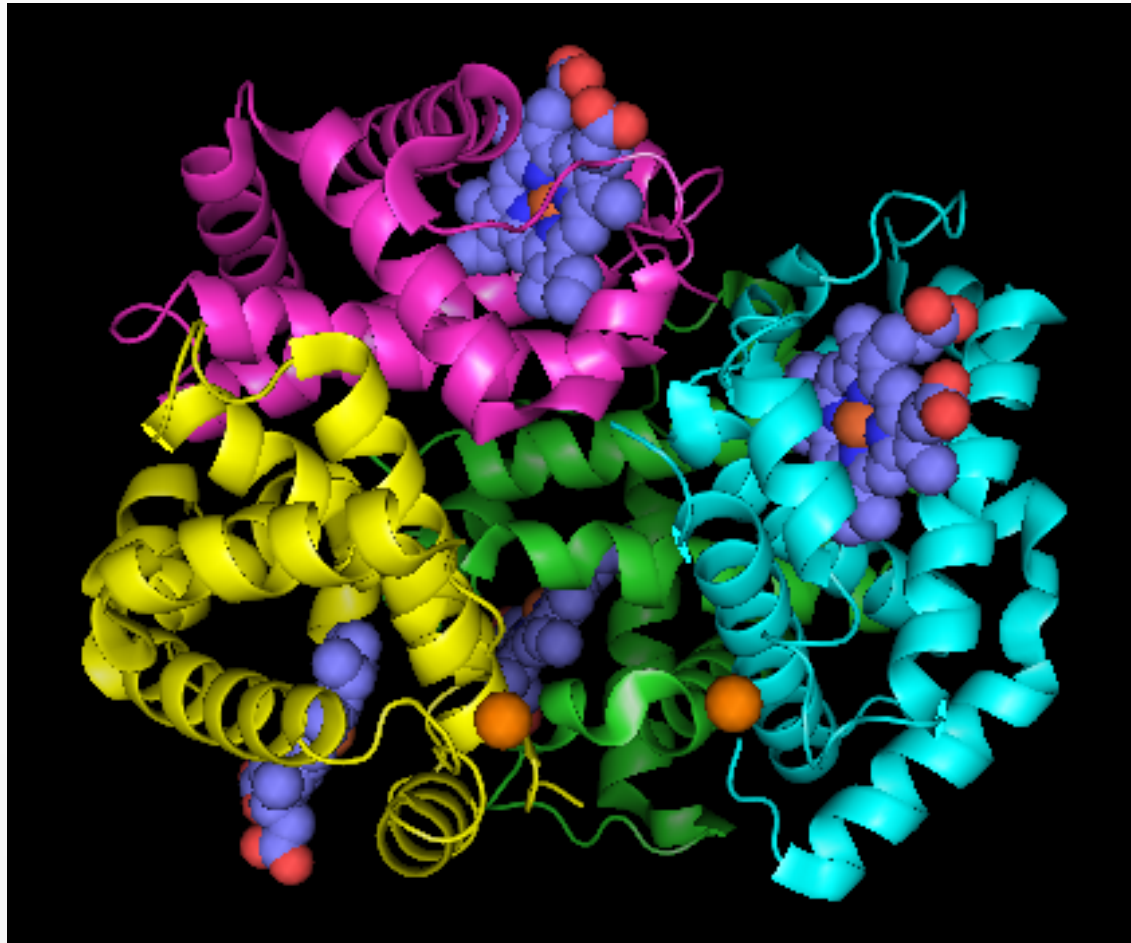
Catena peptidică. Notarea catenelor se face în ordine alfabetică





# Identificarea grupărilor non-proteice într-o structură 3D

10. Selectați toate moleculele de Hem, **colorați-le** funcție de tipul de atomi și reprezentați-le ca sfere.



Ce alte molecule non-proteice sunt în structura afișată?

# Exercițiu 2 – de completat in prezentare

1. Reprezentați molecula dvs. doar ca si cartoon și colorați-o funcție de numărul de catene (**C>by chain**).
2. Afișați secvența de aminoacizi a proteinei dmv. și urmăriți secvența primului lanț polipeptidic peptidic (Chain A).
3. Identificați moleculele non-proteice (exceptând apa) din lanțul A **și faceți o listă cu acestea. Notați lista în fișierul PowerPoint creat în seminarul anterior. Scrieți o legendă scurtă pentru tabel.**
4. Selectați una din structurile non-proteice la alegere. **Reprezentați molecula selectată ca sfere și colorați-o funcție de atomii constituenți. Salvați o imagine cu această reprezentare și inserați-o în fișierul PowerPoint. Scrieți o scurtă legendă pentru figura.**
5. Selectați al 10-lea aminoacid din lanțul polipeptidic A. Adăugați la reprezentare modul licorice pentru a pune în evidență catena laterală și afișați eticheta corespunzătoare aminoacidului. **Mișcați molecula și apropiați-o în așa fel încât eticheta și catena laterală R al celui de-al 10-lea aminoacid să fie vizibile. Salvați o imagine cu această reprezentare și inserați-o în fișierul PowerPoint. Scrieți o scurtă legendă pentru figura.**