

Mail do prowadzącego: lukasz.mioduszewski@interia.pl

Punktacja: zadania 1 i 3 są obowiązkowe, więc próg to 10pkt.

Zadanie 1 (5pkt).

Zainstaluj Gromacsa (instrukcja jest na stronie warsztatów).

Zadanie 2 (2 pkt).

Aby symulować białko, często trzeba mieć jego strukturę. Struktury pobiera się ze strony <http://www.rcsb.org/> jako pliki .pdb. Każdy plik ma swój unikalny czteroznakowy kod. Pierwszego dnia wszyscy będziemy symulować to samo białko (ubikwitynę). Ma ona kod 1UBQ. Zadanie polega na ściągnięciu pliku 1UBQ (wystarczy wpisać w okienko na górze strony „1ubq”, kliknąć enter, a następnie w polu „download files” wybrać „PDB format”), załadowaniu go do programu wizualizującego struktury białek (dla VMD patrz tutorial na stronie warsztatów), i wysłaniu mi screena tej wizualizacji.

Zadanie 3 (5 pkt).

Drugiego dnia każdy będzie symulował własne białko. Zachęcam do własnych pomysłów (inspirację można znaleźć np. na stronie <http://mm.rcsb.org/>), tu parę gotowych propozycji:

1. Badanie, jak enzymy oddziałują ze swoimi substratami na przykładzie kompleksu białka lizozymu ze związkem chemicznym, którego rozpad powoduje. Kod 3HTB
2. Rozciąganie białek tworzących włókna amyloidowe, jakie pojawiają się w chorobie Alzheimera. Pozwoli to pokazać, jak w mózgu tworzą się złoże. Kod 2BEG
3. Działanie leków na przykładzie kompleksu białka trypsyny z lekiem, który jest związkiem unieczynnającym ten enzym trawienny (jest jego inhibitorem). Kod 1AZ8
4. Zwijanie: dla małych białek sam Gromacs wystarczy do ich szybkiego zwinięcia do struktury natywnej. Przykład małego białka, które da się zwinąć, ma kod 1L2Y
5. Nasz układ odpornościowy też składa się z białek. Można badać np. kompleksy, jakie białka naszych limfocytów tworzą z antygenami. Kod 5DMI
6. Przykład bardzo mocnego związania białka-enzymu (barnazy) z jego inhibitorem (który w tym przypadku też jest białkiem). Ich kompleks ma kod 1BGS

Należy zdecydować się na którąś propozycję lub zaproponować własny pomysł, a w każdym wypadku przesłać screena pobranej struktury (analogicznie jak w zadaniu 2).