

Protein databanken.

Insulin ligger størrelsesmæssigt lige på grænsen mellem peptider og proteiner. I insulin er to peptidkæder knyttet sammen via to disulfidbindinger. Disse bindinger går mellem cysteinresiduer i de to peptidkæder.

Her skal man finde analogen 1B9E, downloade den i pdb format og se på dens primær- og sekundærstruktur i Chem3D-Pro.

Det følgende kan anvendes som en online vejledning, *men man kan også udskrive en papirkopi først.*

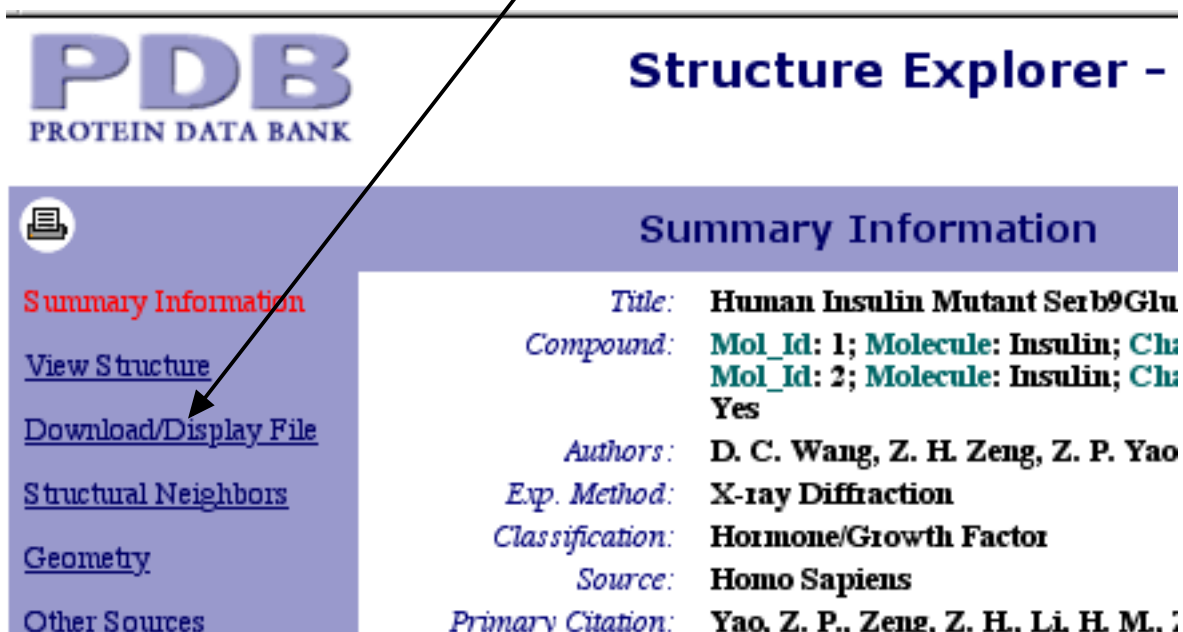
Klik på linket til Protein Databanken herunder for at skabe forbindelse til adressen:

<http://www.rcsb.org/pdb/> .

Alt afhængigt af opsætningen på den anvendte computer kan man blive bedt om at lokalisere browseren. Alternativt kan man åbne sin browser og indtaste ovennævnte www adresse.

Man kan nu i søgefeltet vælge enten at søge på Insulin og manuelt finde 1B9E eller direkte indtaste pdb ID nummeret : 1B9E.

Når mutanten er fundet skal man klikke på



PDB
PROTEIN DATA BANK

Structure Explorer -

Summary Information

Title:	Human Insulin Mutant Serb9Glu
Compound:	Mol_Id: 1; Molecule: Insulin; Ch Mol_Id: 2; Molecule: Insulin; Ch Yes
Authors:	D. C. Wang, Z. H. Zeng, Z. P. Yao
Exp. Method:	X-ray Diffraction
Classification:	Hormone/Growth Factor
Source:	Homo Sapiens
Primary Citation:	Yao, Z. P., Zeng, Z. H., Li, H. M., :

Summary Information
[View Structure](#)
[Download/Display File](#)
[Structural Neighbors](#)
[Geometry](#)
[Other Sources](#)

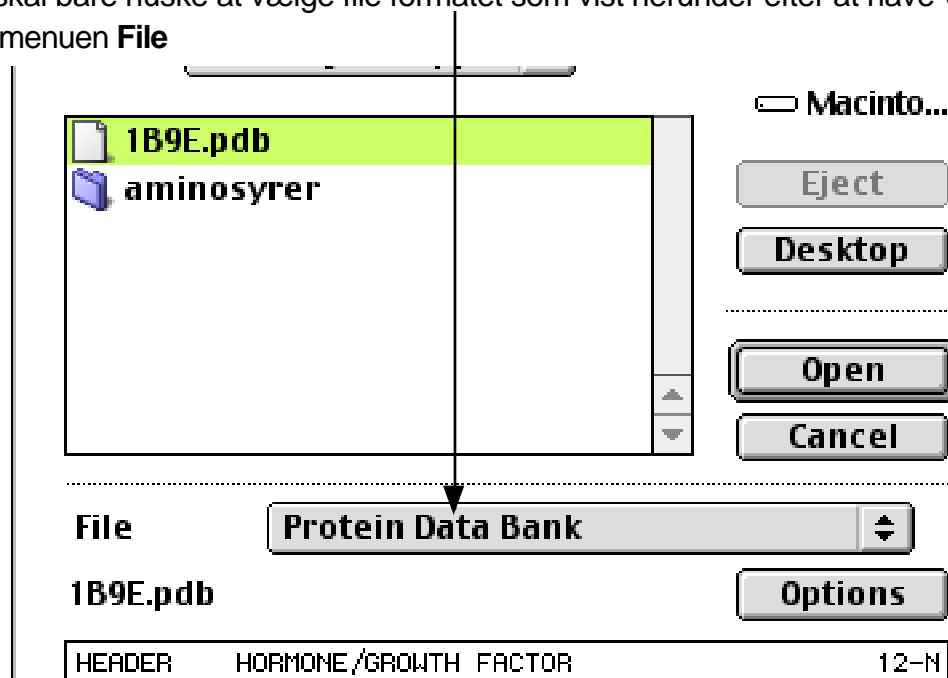
I det næste vindue der fremkommer vælger man at klikke på "X" i ruden som vist på den næste figur :

Download the Structure File:

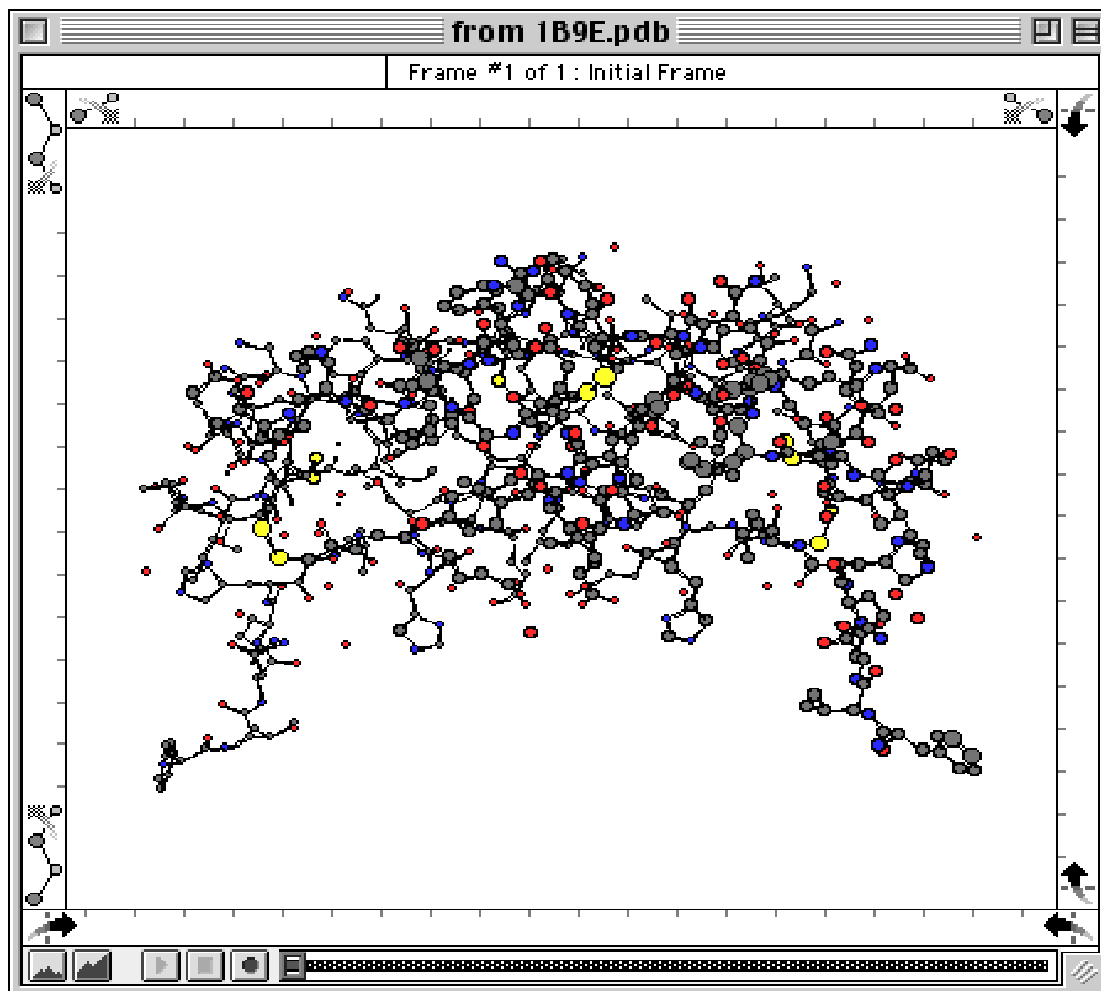
Choose from the following file and [compression formats](#):

compression	file format	
	PDB	mmCIF
none	X	X
Unix compressed	X	X
GNU zipped ("gzipped")	X	X
ZIPped	X	X

Herved downloades pdb filen til ens egen computer hvorefter den kan åbnes i Chem3D-Pro. Man skal bare huske at vælge file formatet som vist herunder efter at have valgt **open** i rullegardinmenuen **File**



Herved bliver molekylet importeret til Chem3D-Pro og man bør nu have følgende skærmvindue:



Svovlatomerne er gule og svovlbroerne findes som nævnt mellem Cysteinresiduerne i de to kæder.

Ved i menuen **Wiew** at vælge **groups** fremkommer aminosyrerækkefølgen i et nyt vindue: (Andre versioner: **Tools, Show Model Table** og så **Groups**).

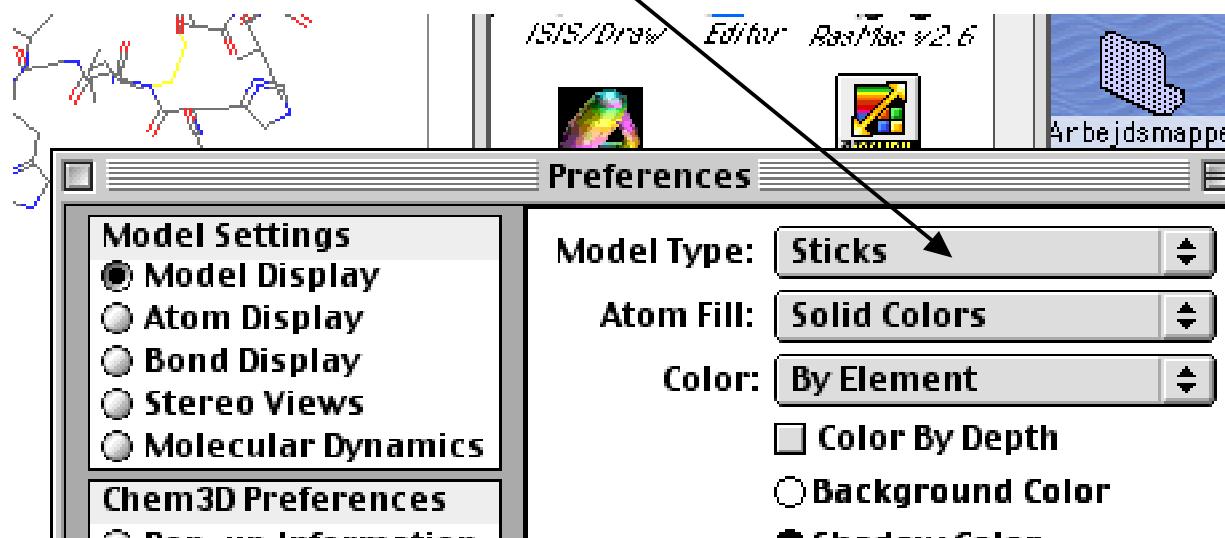
from 1B9E.pdb:Groups			
Name	Ref #	Color	Atoms
<input type="checkbox"/> GLY	1 A		N(1),C(
<input type="checkbox"/> ILE	2 A		N(5),C(
<input type="checkbox"/> VAL	3 A		N(13),C
<input type="checkbox"/> GLU	4 A		N(20),C
<input type="checkbox"/> GLN	5 A		N(29),C
<input type="checkbox"/> CYS	6 A		N(38),C
<input checked="" type="checkbox"/> CYS	7 A		N(44),C
<input type="checkbox"/> THR	8 A		N(50),C
<input type="checkbox"/> SER	9 A		N(57),C
<input type="checkbox"/> ILE	10 A		N(63),C
<input type="checkbox"/> GLU	11 A		N(71),C

Ved at klikke på den 7. ende aminosyre i A-kæden bliver det tilsvarende Cys residue valgt på modellen og man kan se at der udgår en disulfidbro fra A-kæden over til et Cys residue i B-kæden.

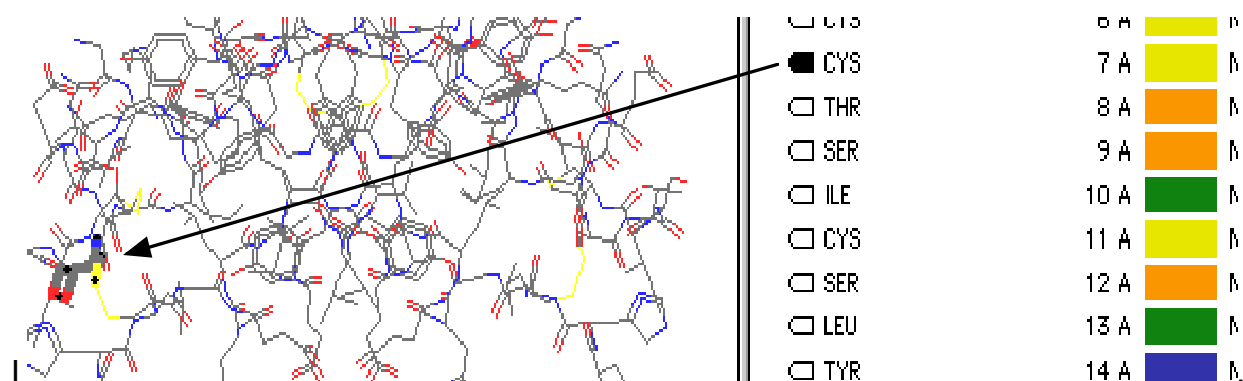
Kan du finde ud af hvilket Cys det drejer sig om i B-kæden ?

Der er endnu en disulfidbro mellem de to kæder, hvor ?

Det er nemmere at finde ud af, hvis du i menuen **Wiew** vælger **Preferences** og i den fremkomne dialogboks vist herunder sætter: (Andre versioner: **Wiew, Settings**).



Når man har valgt Model Type Sticks er det nemt at se hvilke aminosyrer der markeres når man i menuen **Groups** trykker på den pågældende aminosyre:



Der er også en C- og D-kæde her er altså tale om en tetramer hvilket har at gøre med at det er en Røntgenstruktur.

Den sekundære struktur og alle kæderne ses meget tydeligt når man som model type i stedet for Sticks vælger **Ribbons**, som det ses herunder:



Man kan nu dreje på hele eller dele af molekylet for bedre at kunne se snoringerne (α -helix) m.m.

OPGAVE.

Find og undersøg på samme måde hormonet Oxytocin, der er ve regulerende. I stedet for at bruge Protein Databanken så prøv at finde den hos “Chemfinder” med dette link: <http://chemfinder.cambridgesoft.com>

Indtast navnet og bevæg dig nedaf til du ser:

MSDS

[Vedco, Inc.](#)

Structures

[Malathion, Medflies and Medicine structure files](#)

[This compound in PDB format](#)

Enter a chemical name, CAS Number, molecular formula, or

Download the file. Undersøg den. Angiv rækkefølgen af aminosyrer og vis hvor der er disulfidbroer.

Hvis du vil tilbage til begyndelsen klik [HER](#)

