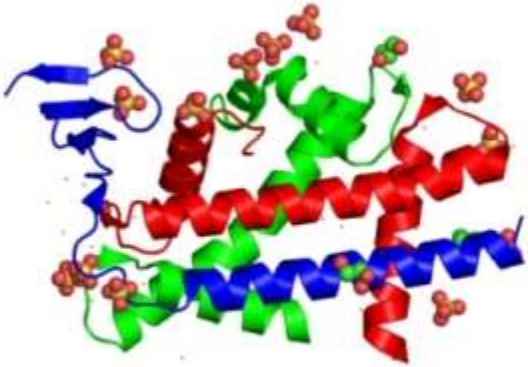


# Gyvybės molekulių galerija

Miglė Tomkuvienė

3r45

PDB

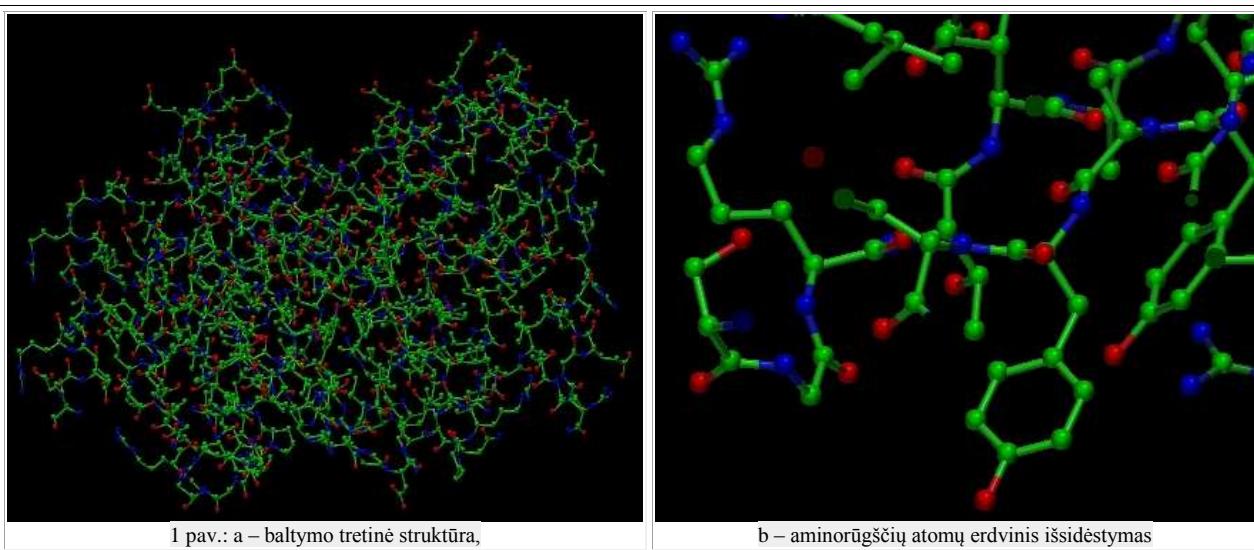


Ar norėtumėte iš labai arti pamatyti baltymus, DNR, RNR, iš visų pusių apžiūrėti jų molekules, pamatyti kiekvieną jų atomą ir netgi „įlįsti“ į jų vidų?

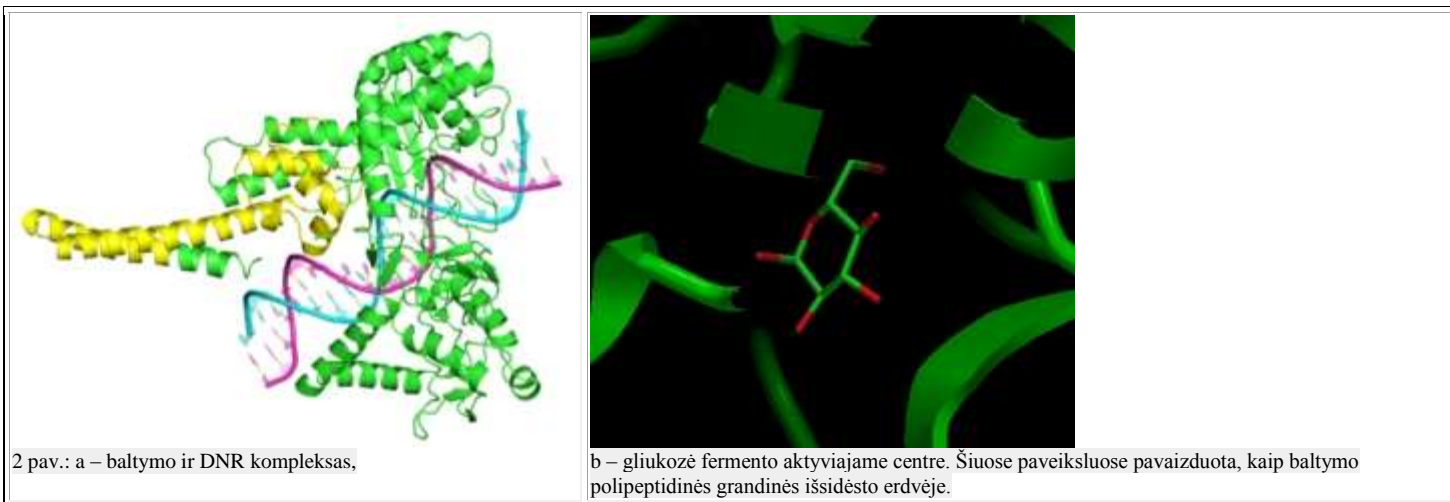
PDB

3r45

Taikant specialius metodus ir naudojant tam tikrą aparatūrą, molekules galima nufotografuoti. Jų nuotraukos dedamos į duomenų bazines. Didelių molekulių (baltymų, DNR) erdvinė struktūra dažniausiai nustatoma pasitelkiant kristalografiją. Pirmiausia sudaromos sąlygos, kurioms esant tiriamos molekulės suformuoja kristalus. Gautas kristalas peršviečiamas rentgeno spinduliais ir pagal tai, kaip kristale esančios molekulės išsklaido spindulius, nustatoma ir aprašoma visų molekulės atomų padėtis erdvėje. Remiantis surinktais duomenimis, molekulės struktūra pateikiama kompiuterio ekrane (1 pav.). Taigi, kaip atrodo molekulė, pirmieji pamato biochemikai kristalografai.

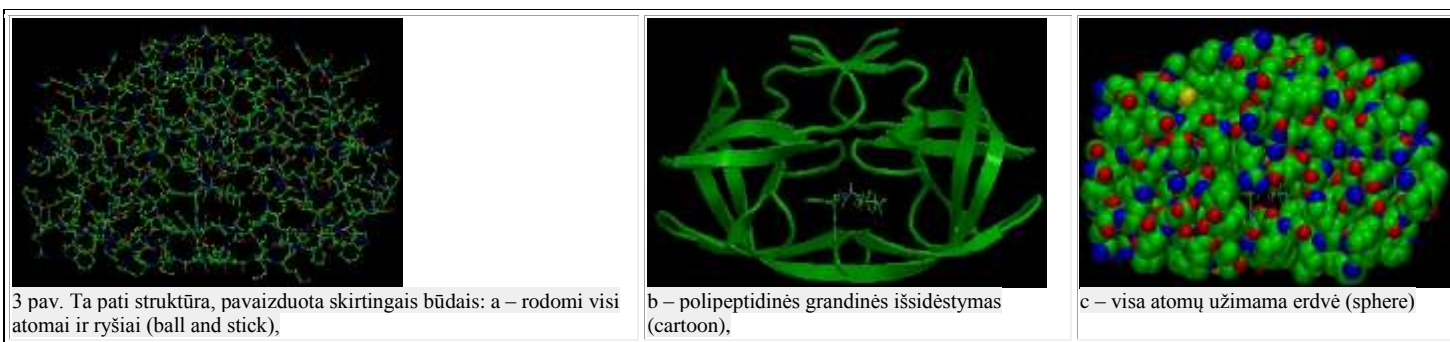


Baltymų duomenų bazėje *Protein data bank* (PDB) šiuo metu saugoma apie 69 000 baltymų struktūrų ir kasdien jų daugėja. Ten galite rasti ne tik pavienių baltymų, bet ir biologiškai svarbių baltymų, baltymų ir nukleorūgščių, taip pat baltymų ir įvairių mažos molekulinės masės junginių, pavyzdžiui, monosacharidų, kompleksų struktūrų (2 pav.).

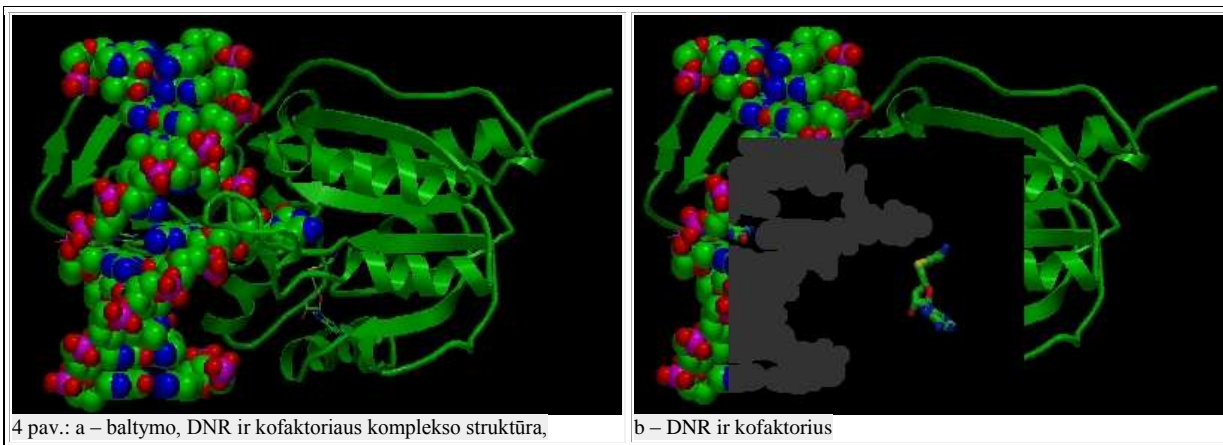


Daugiausia tokiomis duomenų bazėmis naudojami biochemikai. Žinant baltymo erdvinę struktūrą, kaip jis sąveikauja su kitomis molekulėmis, galima numanyti, ne tik kokias funkcijas jis atlieka, bet ir veikimo mechanizmą. Nagrinėjant baltymo struktūrą iškelta hipotezė patikrinama eksperimentiškai. Arba atvirkščiai – eksperimentų rezultatai gali būti paaiškinti remiantis tiriamojo baltymo struktūra. Jei eksperimentai patvirtina numanomą veikimo mechanizmą, galima modeliuoti, kaip jį valdyti, pavyzdžiui, kuriant vaistus.

Apsilankykite PDB svetainėje [www.pdbe.org](http://www.pdbe.org). Pirmajame puslapyje pamatysite, kaip rasti jus dominančią struktūrą ir kokios informacijos apie ją galite gauti. Paieškos langelyje (*Search*) parašykite dominančio baltymo tikslų pavadinimą (pavyzdžiui, *haemoglobin*) arba unikalų keturių simbolių kodą (*PDB ID*), žymintį konkrečią tam tikro junginio (komplekso) struktūrą, pavyzdžiui, 1nt2. Jei nežinote baltymo pavadinimo, sistema gali parinkti visiškai atsitiktinę struktūrą arba atsitiktinę struktūrą su pasirinktu požymiu (*Find a random PDB entry...*). Prie struktūros aprašymo matysite ir veiksmų, kuriuos galite su ja atlikti, sąrašą. Paspaudę mygtuką *Visualisation*, galėsite pasirinkti struktūros vaizdavimo programą (*Astex view*, *Open Astex* ir *Jmol*). Išbandykite jas visas. Kompiuterio ekrane esančią baltymo (komplekso) struktūrą galima visaip vartyti, keisti jos vaizdavimo būdą, pavyzdžiui, rodyti: visus atomus ir ryšius (*ball and stick*), kaip polipeptidinės grandinės išsidėsto erdvėje (*cartoon*) ar visą struktūros užimamą erdvę (*sphere*) ir pan. (3 pav.).



Siūlau panagrinėti struktūrą, žymimą kodu 5mht: matysite DNR, baltymą, katalizuojantį DNR metilinimo reakciją, ir mažą molekulę – kofaktoriaus liekaną (kofaktorius – tai mažos molekulinės masės organinis arba neorganinis junginys, lemiantis fermento aktyvumą.). *Astex view* vaizdavimo programoje pasirinkę *Magic lens*, galėsite lengvai surasti, kur yra DNR, o kur kofaktorius (4 pav.).



*PDBE.org paveikslai*

### Miglės Tomkuvienės pasiūlymai tiriamajam darbui

Pavienujų baltymų ir jų kompleksų molekulės gali būti įvairios formos, pavyzdžiui, siūlų, rutulio, gėlės, pasagos. Paieškokite, kokių formų dar gali būti. Kaip susijusi baltymų molekulių forma ir jų funkcijos?

Pasirinkę meniu elementą *Chemistry*, pamatysite, kokios aminorūgštys ir kokiais ryšiais sąveikauja su ligandais (DNR, mažos molekulinės masės molekulėmis). Panagrinėkite:

- 1) kokios aminorūgštys sąveikauja su ligandu,
- 2) kas dažniau sudaro ryšius: pagrindinė ar šoninė aminorūgščių grandinė,
- 3) kiek aminorūgščių vidutiniškai sąveikauja su ligandu,
- 4) kaip atsakymai į pirmuosius tris klausimus priklauso nuo nagrinėjamo ligando (palyginkite, pavyzdžiui, DNR, gliukozę ir (arba) savo pasirinktą junginį).

Pasirinkite jus dominantį junginį ar metalo joną (pavyzdžiui, gliukozę, geležies joną, vario joną) ir panagrinėkite, kokie baltymai su juo sąveikauja ir kaip ši sąveika susijusi su tų baltymų atliekamomis funkcijomis ląstelėje.

Palyginkite įvairių metalų jonus: su kokiais metalų jonais baltymai daugiausia sudaro kompleksų, kokią funkciją jie atlieka? Sudarykite metalų, sudarančių kompleksus su baltymais, eilę pagal tokių kompleksų skaičių. Ar metalo vieta eilėje keisis, jei kompleksus sugrupuosite pagal organizmus, iš kurių tie kompleksai išskirti? Smagus apsilankymo gyvybės molekulių galerijoje!