## Softwarewerkzeuge der Bioinformatik WS22/23 Gruppe 1 2. Projekt

## Cytochrom P450 2J2

Das menschliche Cytochrom 2J2 metabolisiert endogene mehrfach ungesättigte Fettsäuren, unter anderem Arachidonsäure und Lineolsäure, zu Signalmolekülen die an der Regelung des Blutdrucks beteiligt sind. Weiterhin ist bekannt, daß CYP2J2 in Krebszellen überexprimiert wird. Im Gegensatz zu anderen Cytochromen aus der selben Familie (z.B. 2C9, 2C8, 2C5, 2A6, 2B4, 2D6 und 2R1) gibt es leider noch keine Kristallstruktur. Obwohl das aktive Zentrum und die Tertiärstruktur innerhalb der selben Familie von Cytochromen konserviert sind, können wesentliche Unterschiede auftreten.

## Aufgaben:

Generieren Sie ein Homologiemodell für das menschliche CYP2J2, daß die Mutation T143A enthält (=Allel CYP2J2\*2) auf Basis eines menschlichen Cytochromes aus derselben Familie CYP2. Die Auflösung der Templatstruktur sollte besser als 2.1 Å sein.

Welche Residue ist in Kontakt mit dem Eisen der HEM-Gruppe?

Liegt die Mutation T143A im aktiven Zentrum?

Hinweis: Suchen Sie zunächst die *primary asseccion* Nummer und davon ausgehend die homologen Kristallstrukturen als Template.

## Punkteverteilung:

Sequenzbestimmung 20%
Auswahl der Struktur 20%
Modellierte Struktur 20%
Fragenteil 20%
Dokumentation, allgemein 20%

Lösung auf Deutsch oder Englisch bitte als .pdf Datei bis 12.01.23 an

michael.hutter@bioinformatik.uni-saarland.de

Bitte alle Ihre Namen angeben!