Softwarewerkzeuge der Bioinformatik WS22/23 Gruppe 3 2. Projekt

Cyclin-abhängige Kinase von Eimeria tenella

Eimeria tenella ist ein einzelliger Parasit (Coccidian parasite) der den gastrointestinalen Trakt befällt. Dies führt u.a. bei der Aufzucht von Geflügel zu Verlusten. Als molekulares target für die Bekämpfung dieses und anderer Einzeller ist die cyclin-dependent serine/threonine kinase (CRK2) ausgewählt worden. Aufgrund der Homologie zu menschlichen und anderen eukariotischen cyclin-dependent kinases (CDKs) muß ein geeigneter Inhibitor jedoch die entsprechenden Unterschiede in der Bindungstasche ausnutzen.

Aufgaben:

Konstruieren Sie ein Homologiemodell für die cyclin-dependent serine/threonine kinase von *E. tenella* basierend auf einer Kristallstruktur der homologen Kinase des Menschen (CDK2, cell division protein kinase 2). Die Auflösung der Templatstruktur sollte besser als 2.0 Å sein und einen gebundenen Liganden/Inhibitor enthalten. Lassen Sie sich dazu gegebnenfalls die vollständige Liste der in Frage kommenden Templatstrukturen von SWISS-MODEL anzeigen.

Listen Sie die Unterschiede in den Aminosäuren in der Bindungstasche zwischen Mensch und *E. tenella* auf.

Hinweis: Bestimmen Sie zuerst die *primary asseccion* Nummer der cyclin-dependent serine/threonine kinase von *E. tenella* und suchen Sie zu dieser eine geeignete Kristallstruktur der homologen menschlichen Kinase die als Vorlage zum Erstellen des Homologiemodells verwenden können.

Tip: Die Bindungstasche können Sie durch Vergleich der Bindungsposition von Inhibitoren in den Kristallstrukturen menschlicher CDKs bestimmen.

Punkteverteilung:

Sequenzbestimmung 15% Auswahl Templatstruktur 25% Modellierte Struktur 15% Fragenteil 25% Dokumentation, allgemein 20%

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

michael.hutter@bioinformatik.uni-saarland.de

Bitte Ihre Namen angeben!