

### ThiD *Staphylococcus aureus* strain N315

Bakterien wie *E.coli*, *Salmonella typhimurium*, *Thermus Thermophilus* oder *Staphylococcus aureus* können das benötigte Vitamin B1 (=Thiamin) selbst synthetisieren. Daher sind die Enzyme dieses Biosynthesewegs geeignete Angriffspunkte zur Bekämpfung mit entsprechenden Inhibitoren oder Substratanaloga.

#### Aufgaben:

Gesucht wird eine modellierte Struktur der ThiD (Hydroxymethylpyridine/Phosphomethylpyrimidine Kinase) von *Staphylococcus aureus* (strain N315). Diese katalysiert die Phosphorylierung von Hydroxymethylpyridine (=HMP oder HMH, 4-Amino-5-hydroxymethyl-2-methylpyrimidine), welches von nachfolgenden Enzymen weiter zu Thiamin verarbeitet wird.

Finden Sie anhand eines Sequenzalignment mit homologen Proteinen und einer Kristallstruktur welche HMP bzw. HMH enthält heraus, welche Aminosäure (Position und Typ) der ThiD von *Staphylococcus aureus* Wasserstoffbrücken mit HMP ausbildet.

Hinweis: Suchen Sie zunächst die *primary accession number* und die Sequenz in UniProt. Damit suchen Sie auf SWISS-Model/Template Identification eine geeignete Kristallstruktur eines homologen Proteins das Sie als Vorlage zur Modellierung verwenden können.

Notieren Sie sich auch die anderen gefundenen Template/Kristallstrukturen zur Lösung der Fragen.

#### Punkteverteilung:

Sequenzbestimmung	15%
Auswahl Templatstruktur	15%
Modellierte Struktur	20%
Fragenteil	30%
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!