

Softwarewerkzeuge der Bioinformatik

Prof. Dr. Volkhard Helms

PD Dr. Michael Hutter, Markus Hollander, Marcial Josef Paszkiel

Wintersemester 2022/23

Übungsblatt 7

Lernziel: Visualisierung von Proteinstrukturen und Protein-Ligand Wechselwirkungen, Auswertung von Homologiemodellen

Proteinstruktur: Homologiemodellierung

Das interaktive Material zur Übung finden Sie unter diesem Link:

<https://service.bioinformatik.uni-saarland.de/sww/tutorial-7.php>

Folgen Sie dann dem Link 1. Cytochrom 109D1 aus *Sorangium cellulosum*

- (1) Ermitteln Sie die zugehörigen *accession code* dieses Proteins (www.uniprot.org).
- (2) Gibt es mit SWISS-Model Repository (<http://swissmodel.expasy.org>) schon ein fertiges Homologie-Modell für dieses Protein? Dazu müssen Sie nur den accession code eingeben (Im Reiter Repository → Suchen). Wenn ja, basierend auf welcher pdb Datei?
- (3) Speichern Sie das Homologiemodell (von SWISS-Model) und das entsprechende Templat (von Template Link [RCSB]). Legen Sie diese in VMD, Chimera, oder pymol über einander. Geben Sie den beiden Strukturen unterschiedliche Farben und wählen Sie als drawing method „Cartoon“ aus.
Welche chain des Templates passt (falls mehrere vorhanden sind)?
- (4) Von welchem Organismus stammt die Templat Struktur?
- (5) An welchen Stellen treten die größten Abweichungen auf?
Vergleichen Sie diese Stellen mit dem Sequenzalignment.
- (6) Welche Koordinationszahl hat das Eisenatom der Hämgruppe (HEM)?
- (7) Welches Molekül könnte die freie Koordinationsstelle am Eisen einnehmen (Denken Sie an die Funktion des Cytochroms)

Vorgehensweise zu den Projekten:

Lesen Sie sich zuerst die Aufgabenstellung durch.

Ermitteln Sie die gesuchte(n) *accession number(s)* des/der Protein(s/e).

Suchen Sie in SWISS-Model nach verfügbaren Templaten (Schaltfläche → Template Identification). Wählen Sie davon ein geeignetes zum Erstellen des Homologie-Modells aus. Erläutern Sie die Gründe für Ihre Templat-Wahl (Sequenzähnlichkeit, Auflösung, Gaps).

Legen Sie Homologie-Modell und Templat übereinander.

Tip: Benutzen Sie dazu die Darstellungsform Cartoon.

An welchen Stellen treten die größten Abweichungen auf?

Vergleichen Sie diese Stellen mit dem Sequenz-Alignment zwischen Modell und Templat das SWISS-MODEL generiert hat.

Beurteilen Sie die Qualität des Modells. (Score Bewertungen von SWISS-Model)

Beachten Sie auch den Fragenteil des jeweiligen Projekts.