

Übungsblatt 6

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

Proteinstruktur: Homologiemodellierung

Das interaktive Material zur Übung finden Sie unter diesem Link:

https://www-cbi.cs.uni-saarland.de/wp-content/uploads/Softwarewerkzeuge_Teil_2/start2a.html

Aufgabe 6.1: Homologie-Modelling

Folgen Sie dann dem Link

1. Punktmutationen in cAPK

- (1) Von welchem Organismus stammt die Sequenz?
- (2) Welcher Organismus wurde zur Expressierung verwendet?
- (3) Wie hoch ist die angegebene (beste) Auflösung der Kristallstruktur?
- (4) Welche (nicht-Protein) Moleküle sind außerdem vorhanden?
- (5) Ermitteln Sie die zugehörige accession number (nicht in der Datei zu finden)

Untersuchen Sie 1ATP.pdb mit Hilfe eines Visualisierungsprogramms (mittels eines Programms Ihrer Wahl, oder direkt auf der Webseite mittels 3D View)

- (6) Finden Sie das aktive Zentrum
- (7) Was ist die „chain E“ und was ist „chain I“ ?
- (8) Welche Konsequenzen müßte der Austausch von Asp166 gegen Ala zur Folge haben? Führen Sie diese Mutation an der Sequenz im FASTA Format mit Hilfe eines Texteditors durch.
- (9) Vergleichen Sie das entsprechende Homologiemodell mit dem Wildtyp. Denken Sie daran, daß sich die Sequenznummerierung verschoben haben kann, wenn in der Kristallstruktur die Nummerierung nicht bei 1 beginnt. Gibt es entscheidende Änderungen an der Proteinstruktur?

Hinweis: Für das zweite Projekt benötigen Sie ein Programm zur Visualisierung von Proteinstrukturen (.pdb Dateien), wie etwa VMD, PyMol, USCF Chimera, SWISS-PDB Viewer / DeepView,...

Um VMD auf den CIP-Pool Rechnern zu starten öffnen Sie zunächst ein Terminalfenster oder eine Konsole, und geben folgende Kommandozeile ein (mit der Eingabetaste bestätigen):

```
vmd oder /usr/local/bin/vmd
```