

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://www-cbi.cs.uni-saarland.de/wp-content/uploads/Softwarewerkzeuge_Teil_2/start3a.html

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 im 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 einem Visualisierungsprogramm (VMD; Chimera,...) übereinander. 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 Template 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 Bewertung von SWISS-Model)

Beachten Sie auch den Fragenteil des jeweiligen Projekts.