

## Übungen zur Vorlesung

### Einführung in die angewandte Bioinformatik

Sommersemester 2008

10.07.2008

Blatt 10

#### **Aufgabe 10.1 – Sekundärstruktur vorhersagen**

Sie sind an einer Sekundärstrukturvorhersage vom Protein mit der UniProt-Accession-Nummer P23458 interessiert. Benutzen Sie die Tools PSIPred und SSpro (Links dazu finden Sie auf der Expasy-Seite). Bei beiden Tools werden Ihnen die Ergebnisse per E-Mail zugeschickt. Wählen Sie bei SSpro als Methode SSpro und SSpro8 aus. Schicken Sie zunächst nur Ihre beiden Jobs los und machen Sie dann direkt mit den folgenden Aufgaben weiter.

#### **Aufgabe 10.2 – Ein Kaliumkanal-Protein**

Suchen Sie in UniProt nach Kaliumkanal-Proteinen des Menschen. Wie viele Treffer gibt es?

---

Betrachten Sie nun den Treffer P48048. Wie lang ist die kanonische Isoform und welche Masse hat sie?

---

Wo in der Zelle ist das Protein lokalisiert?

---

Wie viele Transmembran-Helices enthält das Protein und wo in der Sequenz befinden sie sich?

---

Gibt es hierzu eine 3D-Struktur in der PDB? \_\_\_\_\_

Schauen Sie sich den Link zu HSSP, einem Protein-Sekundärstrukturvorhersagetool an: Auf welchem PDB-Eintrag basiert der? \_\_\_\_\_ Wie lautet die zugehörige UniProt-Accession-Nummer? \_\_\_\_\_

Nehmen Sie die Mausversion des Proteins, wenn Sie dem Link folgen.

Worum handelt es sich hierbei?

---

Kann man davon ausgehen, dass die Domänenarchitektur übertragen werden kann?

---

Starten Sie in PDB dem MTBSimpleViewer, um das Molekül in 3D zu betrachten. Probieren Sie auch die anderen Viewer aus.

Wie sieht die Quartärstruktur des PDB-Moleküls aus?

---

Warum besteht die asymmetrische Einheit aus zwei Teilen?

---

Wie lauten die Top-Level SCOP- und CATH-Klassifikationen des PDB-Moleküls?

---

Wie passt das damit zusammen, dass das ursprüngliche Protein zwei Helices hat?

---

Betrachten Sie auch die zugehörige Pfam-Domain \_\_\_\_\_, insbesondere die HMM-Logo-Darstellung. Ab welcher Position wird das Modell sehr unspezifisch?

---

### **Aufgabe 10.3 – Proteinverdau**

Sie möchten nun wissen, wie die beiden Enzyme Trypsin und Enterokinase das Enzym Janus kinase 1 (aus dem Menschen) verdauen würden. Benutzen Sie dazu den PeptideCutter, z. B. indem Sie diesen von der Expasy-Seite aus aufrufen. Wie lautet die UniProt-Accession-Nummer von Janus kinase 1? \_\_\_\_\_

An welchen Stellen schneidet Enterokinase dieses Protein?

---

Wie häufig schneidet Trypsin? \_\_\_\_\_ Schauen Sie sich die Schnittpositionen an. Welchen Grund gibt es, dieses Experiment in Wirklichkeit nicht durchzuführen?

---

### **Aufgabe 10.4 – ProtParam**

Benutzen Sie ProtParam, was Sie wiederum auf der Expasy-Seite finden, um sich ein paar weitere interessante Daten zur Janus kinase 1 berechnen zu lassen. Lassen Sie ProtParam auf der ganzen Sequenz laufen, nicht auf einem einzelnen Fragment. Wie hoch ist der Anteil der Tyrosine an den Aminosäuren? \_\_\_\_\_

Wo liegt der isoelektrische Punkt? \_\_\_\_\_

Wie viele Stickstoffatome sind im Molekül vorhanden? \_\_\_\_\_

### **Aufgabe 10.5 – Sekundärstruktur vorhersagen – Teil 2**

Inzwischen sollten Sie per E-Mail ihre Resultate von SSpro und PSIPred erhalten haben. Nehmen Sie jeweils die ersten ca. 100 Zeichen der drei Ergebnisse und der PSIPred-Konfidenzen und kopieren Sie diese in einen Texteditor, ein Ergebnis pro Zeile. Korrelieren Unterschiede bzw. Übereinstimmungen mit niedrigen bzw. hohen (von PSIPred ermittelten) Konfidenzen?

---