

Forschungstage Informatik 2015 – Bioinformatik Workshop

Prof. Dr. Volkhard Helms
Daria Gaidar, Kerstin Reuter
Chair of Computational Biology

Universität des Saarlandes
Zentrum für Bioinformatik

Aufgabenblatt 2

Exploring the evolution of light-sensitive proteins

<http://emblog.embl.de/ells/teachingbase/opsins-bioinformatics>

Aufgabe 2.1: Identifikation des "unbekannten" Proteins

- Um welches Protein handelt es sich beim besten Treffer in der Datenbank?
- Wie hoch (Prozente) ist die Identität (*identity*) zwischen dem besten Treffer und dem "unbekannten" Protein?
- Was für eine Funktion hat der gefundene, und daher bekannte, beste Treffer?
- Aus welchem Organismus stammt das Protein?
- In welchem Zellkompartiment ist das Protein zu finden?
- Wie heißt das zugehörige Gen?

Aufgabe 2.2: Multiples Sequenz Alignment

- Was kann aus dem multiplen Sequenz Alignment abgelesen werden?
- Gibt es Abschnitte in der Sequenz, die konservierter sind als andere? Wenn ja, wie viele könnt ihr finden?
- Gibt es konservierte Reste (*residues*) oder Motive, die man in allen Sequenzen finden kann? Aufgepasst: eine der Sequenzen ("Danio_mel_rec1A") ist kein Opsin sondern ein evolutionär verwandtes Molekül (wichtig für den nächsten Aufgabenteil).

Aufgabe 2.3: Phylogenetische Analyse der alignierten Protein Sequenzen

- Schaut euch die Struktur des Baumes an. Eine Sequenz zeichnet sich von den anderen ab (*outgroup*). Welche ist das? Warum denkt ihr, ist es gerade diese Sequenz?
- Im Baum gibt es zwei große Untergruppen. Entspricht diese Aufteilung grundsätzlich der evolutionären Beziehung zwischen den einzelnen Spezies? Könnt ihr irgendwelche Ausnahmen feststellen?

Aufgabe 2.4: Topologische und strukturelle Analyse von Proteinen

- Versucht die folgenden Fragen mit Hilfe von Uniprot zu beantworten:
 - Wie viele transmembrane Regionen besitzt das Protein und wie sind diese im Protein verteilt?
 - Wie sieht die sekundär-Struktur des Proteins aus? Gibt es mehr alpha-Helices oder mehr beta-Faltblätter?
- Schaut euch die dreidimensionale Struktur an und versucht folgende Fragen zu beantworten:

- Wie ist das bovine Rhodopsin geformt?
- Könnt ihr die einzelnen alpha-Helices und beta-Faltblätter identifizieren? Das Protein wurde als Dimer kristallisiert, was bedeutet, dass es zwei Polypeptid Untereinheiten enthält. Könnt ihr jeweils die beiden 7 Transmembranhelices erkennen?
- Könnt ihr die Chromophor Bindeseite innerhalb der *ribbon* Struktur finden?