

# Proteine und Nucleinsäuren zeichnen mit Swiss pdb viewer

Herunterladen der Atomkoordinaten aus der RCSB Protein Data Bank:

<http://www.rcsb.org/pdb/home/home.do>

- In der obersten Zeile ein Stichwort oder die Identifikationsnummer eingeben, z.B. 1EPL (Ein Pepsin mit Substrat) → search
- Ganz rechts-oben unter "Download Files" das File als pdb-File (Text) an einem wiederauffindbaren Ort speichern.

Start:

- Start/Programme/Unterricht/Chemie „Swiss-pdb.exe“ suchen und starten
- Pop up mit Klick auf das Kreuz rechts oben wegklicken
- Das oben gespeicherte File suchen und öffnen. Allfällige Meldungen wegklicken.

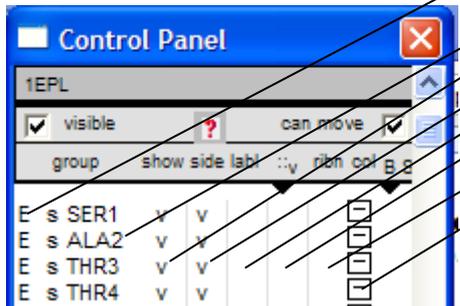
Bewegen:

- Das Molekül kann nun gedreht werden, es sollte dabei der Mauszeiger  erscheinen. Mit der Taste  kann gezoomt werden. Vorderhand sind nur die Bindungen ersichtlich. Die Farben sind gemäss den beteiligten Atomen, also Rot=O, Blaue=N etc. H sind nicht dargestellt, C sind weiss bei schwarzem Hintergrund.

Verändern der Darstellung:

- Schalte unter der Schaltfläche "Window" das "Control Panel" ein. Jetzt wird die Aminosäure- bzw. Nucleinsäuresequenz ersichtlich. Für uns wichtig sind folgende Spalten (Beispiel mit DNS):

...



group	show side labl	v	ribn	col	B B
E s SER1	v	v			
E s ALA2	v	v			
E s THR3	v	v			
E s THR4	v	v			

Der Mausklick links in einer Spalte wirkt sich nur auf einen Baustein aus. Der Mausklick rechts auf alle in der jeweiligen Spalte. Mausklick rechts auf die Raumfüllung ergibt ein Punktemuster, welches die Atomoberflächen andeutet. "Display/Render in solid 3-D" ergibt ein raumfüllendes Modell. Evtl. muss die Operation zweimal durchgeführt werden bis es klappt.

Farben

- Unter dem Menu "Color" kann nun das Molekül unterschiedlich eingefärbt werden. Dies geht nur bei den Proteinen. CPK ist mit eingefärbten Atomen, Type färbt nach basischen, sauren, polaren und hydrophoben Aminosäuren ein. Secondary structure" färbt gemäss Sekundärstrukturen.

Bänder

- Soll die Darstellung besonders übersichtlich sein empfiehlt sich ein Bändermodell. Es zeigt vereinfacht den Verlauf des Makromoleküls an: Rechtsklick auf "ribn" im Control Panel.

Suchen nach Molekülbestandteilen:

- Rechtsklick auf "col" im Control Panel und das ganze Molekül z.B. Gelb einfärben. Mit OK bestätigen. Im Control Panel die gewünschte Aminosäure oder jeden anderen Bestandteil des Moleküls suchen und mit Linksklick nur diesen Bestandteil anders einfärben.
  - Umgekehrt kann im Menu "Select" nach drücken der Schaltfläche Pick on Screen mit dem Mauszeiger ein Atom im Bild angeklickt werden und die entsprechende Aminosäure wird im Control Panel
- D:\Schule\Manuskripte\Grundlagenfachmaterial\Kapitel 13 Proteine\Arbeitsblatt Protein mit swiss pdb-viewer.doc

Panel rot eingefärbt. Dazu muss die Ctrl Taste gedrückt werden, solange man Atome anwählt. Mit Esc wird der Vorgang abgeschlossen.

Darstellung von H-Brücken:

- Im Menu "Tools" mit Compute H-Bonds dieselben berechnen. Anschliessend im Menu "Display" die H-Brücken Ansicht aktivieren.

Auftrag:

Kläre im Enzym Pepsin folgende Punkte ab:

- Welche Gruppe von Aminosäuren hat das Protein hauptsächlich auf seiner Oberfläche exponiert?
- Wie viele Disulfidbrücken besitzt es?
- Enthält das Enzym alle uns bekannten Sekundärstrukturen?
- Findet man eine ionische Wechselwirkung? Wenn ja, zwischen welchen Aminosäuren?
- Wo ist das Substrat (hier ein Heptapeptid) im Enzym gebunden?
- Wie viele H-Brücken stabilisieren das Protein?