

# Zusätzliches Material

## Inhaltsverzeichnis

Einführung .....	1
1. Chymo1.1.....	2
1.1. Originale Sequenz.....	2
1.2. Mutierte Sequenz.....	2
1.3. Eingefügte Mutationen .....	2
2. Chymo1.2.....	3
2.1. Originale Sequenz.....	3
2.2. Mutierte Sequenz.....	3
2.3. Eingefügte Mutationen .....	3
2.4. erstes Docking .....	4
2.5. erstes Design .....	5
2.6. zweites Docking .....	6
2.7. zweites Design .....	7
2.8. Final .....	8
3. Chymo 1.3.....	10
3.1. Originale Sequenz.....	10
3.2. Mutierte Sequenz.....	10
3.3. eingefügte Mutationen .....	10
3.4. erstes Docking .....	11
3.5. erstes Design .....	12
3.6. zweites Docking .....	13
3.7. zweites Design .....	14
3.8. Final .....	15
4. Chymo 2.1.....	17
4.1. Originale Sequenz.....	17
4.2. Mutierte Sequenz.....	17
4.3. Eingefügte Mutationen .....	17
4.4. erstes Docking .....	18
4.5. erstes Design .....	19
4.6. zweites Docking .....	20
4.7. zweites Design .....	21
4.8. Final .....	22

5.	Chymo 2.2.....	24
5.1.	Originale Sequenz.....	24
5.2.	Mutierte Sequenz.....	24
5.3.	Eingefügte Mutationen .....	24
5.4.	erstes Docking .....	25
5.5.	erstes Design .....	26
5.6.	zweites Docking.....	27
5.7.	zweites Design.....	28
5.8.	Final .....	29
6.	Chymo 2.3.....	31
6.1.	Originale Sequenz.....	31
6.2.	Mutierte Sequenz.....	31
6.3.	Eingefügte Mutationen .....	31
6.4.	erstes Docking .....	32
6.5.	erstes Design .....	33
6.6.	zweites Docking.....	34
6.7.	zweites Design.....	35
6.8.	Final .....	36
7.	FLS2_1.....	38
7.1.	Originale Sequenz.....	38
7.2.	Mutierte Sequenz.....	39
7.3.	Eingefügte Mutationen .....	40
8.	FLS2_2.....	41
8.1.	Originale Sequenz.....	41
8.2.	Mutierte Sequenz.....	41
8.3.	Eingefügte Mutationen .....	42
8.4.	erstes Docking .....	43
8.5.	erstes Design .....	44
8.6.	zweites Docking.....	45
8.7.	zweites Design.....	46
8.8.	Final .....	47
9.	FLS2_3.....	49
9.1.	Originale Sequenz.....	49
9.2.	Mutierte Sequenz.....	49
9.3.	Eingefügte Mutationen .....	50
9.4.	erstes Docking .....	51

9.5.	erstes Design .....	52
9.6.	zweites Docking.....	53
9.7.	zweites Design .....	54
9.8.	Final .....	55

## Abbildungsverzeichnis

Abbildung 1:	PyMol-Bilder der Anfangsstruktur und der Struktur nach dem ersten Docking. ....	4
Abbildung 2:	PyMol-Bilder der Struktur nach dem ersten Docking und nach dem ersten Design. ....	5
Abbildung 3:	PyMol-Bilder der Struktur nach dem ersten Design und nach dem zweiten Docking.....	6
Abbildung 4:	PyMol-Bilder der Struktur nach dem zweiten Docking und die finale Struktur nach dem zweiten Design. ....	7
Abbildung 5:	PyMol-Bilder der Ausgangsstruktur und die finale Struktur nach dem zweiten Design..	8
Abbildung 6:	PyMol-Bilder der finalen Struktur.....	9
Abbildung 7:	PyMol-Bilder der Anfangsstruktur und der Struktur nach dem ersten Docking. ....	11
Abbildung 8:	PyMol-Bilder der Struktur nach dem ersten Docking und nach dem ersten Design.....	12
Abbildung 9:	PyMol-Bilder der Struktur nach dem ersten Design und nach dem zweiten Docking....	13
Abbildung 10:	PyMol-Bilder der Struktur nach dem zweiten Docking und die finale Struktur nach dem zweiten Design. ....	14
Abbildung 11:	PyMol-Bilder der Ausgangsstruktur und die finale Struktur nach dem zweiten Design. ....	15
Abbildung 12:	PyMol-Bilder der finalen Struktur.....	16
Abbildung 13:	PyMol-Bilder der Anfangsstruktur und der Struktur nach dem ersten Docking. ....	18
Abbildung 14:	PyMol-Bilder der Struktur nach dem ersten Docking und nach dem ersten Design....	19
Abbildung 15:	PyMol-Bilder der Struktur nach dem ersten Design und nach dem zweiten Docking... <td>20</td>	20
Abbildung 16:	PyMol-Bilder der Struktur nach dem zweiten Docking und die finale Struktur nach dem zweiten Design. ....	21
Abbildung 17:	PyMol-Bilder der Ausgangsstruktur und die finale Struktur nach dem zweiten Design. ....	22
Abbildung 18:	PyMol-Bilder der finalen Struktur.....	23
Abbildung 19:	PyMol-Bilder der Anfangsstruktur und der Struktur nach dem ersten Docking. ....	25
Abbildung 20:	PyMol-Bilder der Struktur nach dem ersten Docking und nach dem ersten Design....	26
Abbildung 21:	PyMol-Bilder der Struktur nach dem ersten Design und nach dem zweiten Docking... <td>27</td>	27
Abbildung 22:	PyMol-Bilder der Struktur nach dem zweiten Docking und die finale Struktur nach dem zweiten Design. ....	28
Abbildung 23:	PyMol-Bilder der Ausgangsstruktur und die finale Struktur nach dem zweiten Design. ....	29
Abbildung 24:	PyMol-Bilder der finalen Struktur.....	30
Abbildung 25:	PyMol-Bilder der Anfangsstruktur und der Struktur nach dem ersten Docking. ....	32
Abbildung 26:	PyMol-Bilder der Struktur nach dem ersten Docking und nach dem ersten Design....	33
Abbildung 27:	PyMol-Bilder der Struktur nach dem ersten Design und nach dem zweiten Docking... <td>34</td>	34
Abbildung 28:	PyMol-Bilder der Struktur nach dem zweiten Docking und die finale Struktur nach dem zweiten Design. ....	35
Abbildung 29:	PyMol-Bilder der Ausgangsstruktur und die finale Struktur nach dem zweiten Design. ....	36
Abbildung 30:	PyMol-Bilder der finalen Struktur.....	37
Abbildung 31:	FLS2 mit BAK1 und dem eingesetzten Spike-Peptid 816 nach dem ersten Docking. ....	43

Abbildung 32: FLS2 mit BAK1 und dem eingesetzten Spike-Peptid 816 nach dem ersten Design. ....	44
Abbildung 33: FLS2 mit BAK1 und dem eingesetzten Spike-Peptid 816 nach dem zweiten Docking...	45
Abbildung 34: FLS2 mit BAK1 und dem eingesetzten Spike-Peptid 816 nach dem zweiten Design....	46
Abbildung 35: Vergleich der Ausgangs- mit der finalen Struktur von FLS2 mit BAK1 und dem eingesetzten Spike-Peptid 816.....	47
Abbildung 36: Darstellung der finalen Struktur mit der jeweiligen Bindefläche. ....	48
Abbildung 37: FLS2 mit BAK1 und dem eingesetzten Spike-Peptid 942 nach dem ersten Docking....	51
Abbildung 38: FLS2 mit BAK1 und dem eingesetzten Spike-Peptid 942 nach dem ersten Design. ....	52
Abbildung 39: FLS2 mit BAK1 und dem eingesetzten Spike-Peptid 942 nach dem zweiten Docking...	53
Abbildung 40: FLS2 mit BAK1 und dem eingesetzten Spike-Peptid 942 nach dem zweiten Design....	54
Abbildung 41: Vergleich der Ausgangs- mit der finalen Struktur von FLS2 mit BAK1 und dem eingesetzten Spike-Peptid 942.....	55
Abbildung 42: Darstellung der finalen Struktur mit der jeweiligen Bindefläche. ....	56

## Tabellenverzeichnis

Tabelle 1: In Chymo 1.1 eingefügten Mutationen .....	2
Tabelle 2: In Chymo1.2 eingefügte Mutationen. ....	3
Tabelle 3: in Chymo 1.3 eingefügte Mutationen.....	10
Tabelle 4: in Chymo2.1 eingefügte Mutationen.....	17
Tabelle 5: in Chymo2.2 eingefügte Mutationen.....	24
Tabelle 6: in Chymo2.3 eingefügte Mutationen.....	31
Tabelle 7: In FLS2_1 eingefügte Mutationen in den FLS2-Rezeptor. ....	40
Tabelle 8: In FLS2_1 eingefügte Mutationen des BAK1. ....	40
Tabelle 9: In FLS2_2 eingefügten Mutationen. ....	42
Tabelle 10: In FLS2_3 eingefügte Mutationen. ....	50

## **Einführung**

In diesem Anhang werden sowohl die neu erstellten finalen Albumin- als auch die finalen FLS2-BAK1-Varianten dargestellt. Die jeweiligen Strukturen werden nach jedem erfolgten Rosetta-Schritt graphisch gegenübergestellt. Außerdem ist zu Beginn jeweils die originale und die mutierte Sequenz zu sehen. In tabellarischer Ansicht werden die mutierten Aminosäuren gezeigt.

## 1. Chymo1.1

### 1.1. Originale Sequenz

Im Folgenden ist die originale Peptidsequenz von Albumin zu sehen. In Rot sind die auszutauschenden Aminosäuren markiert.

```
>1AO6_1|Chains A,B|SERUM ALBUMIN|Homo sapiens (9606)
001 DAHKSEVAHRFKDLGEENFKALVLIAFAQYIQLQQCPFEDHVKLVNEVTEFA 050
051 KTCVADESAENCDKSLHTLFGDKLCTVATLRETYGEMADCCAKQEPPERNE 100
101 CFLQHKDDNPNLPRLVRPEVDVMCTAFHDNEETFLKKLYEIARRHPYFY 150
151 APELLFFAKRYKAAFTECCQADAKAACLLPKLDELRDEGKASSAKQRLKC 200
201 ASLQKFGERAFKAWAVARLSQRFPKAEFAEVSKLVTDLTKVHTECCHGDL 250
251 LECADDRADLAKYICENQDSISSKLKECCEKPLLEKSHCIAEVENDEMPA 300
301 DLPSLAADFVESKDVCKNYAEAKDVFLGMFLYEYARRHPDYSVVLLRLA 350
351 KTYETTLEKCCAAADPHECYAKVFDEFKPLVEEPQNLIKQNCELFEQLGE 400
401 YKFQNALLVRYTKVPQVSTPTLEVSRNLGKVGSKCCKHPEAKRMPCAE 450
451 DYLSVVLNQLCVLHEKTPVSDRVTKCCTESLVNRRPCFSALEVDETYPVK 500
501 EFNAETFTFHADICTSEKERQIKKQTALVELVKHKPKATKEQLKAVMDD 550
551 FAAFVEKCCKADDKETCFAEEGKKLVAASQAALGL 585
```

### 1.2. Mutierte Sequenz

Im Folgenden ist die mutierte Peptidsequenz von Chymo1.1 zu sehen. In Grün sind die ausgetauschten Aminosäuren markiert.

```
>Chymo1.1
001 DAHKSEVAHRFKDLGEENFKALVLIAFAQYIQLMCPVYVHVKLVNEVTEFA 050
051 KTCVADESAENCDKSLHTLFGDKLCTVATDRSFYGEMADCCAKQEPPERNE 100
101 CFLQHKDDNPPPLPMWLPEVDYMCTAFHDNEETFLKFYLIEIAIRHPYFY 150
151 APELLFFAKRYKAAFTECCQADAKAACLLPKLDELRDEGKASSAKQRLKC 200
201 ASLQKFGERAFKAWAVARLSQRFPKAEFAEVSKLVTDLTKVHTECCHGDL 250
251 LECADDRADLAKYICENQDSISSKLKECCEKPLLEKSHCIAEVENDEMPA 300
301 DLPSLAADFVESKDVCKNYAEAKDVFLGMFLYEYARRHPDYSVVLLRLA 350
351 KTYETTLEKCCAAADPHECYAKVFDEFKPLVEEPQNLIKQNCELFEQLGE 400
401 YKFQNALLVRYTKVPQVSAMTLEVSRNLGKVGSKCCKHPEAKRMPCAE 450
451 DYLSVVLNQLCVLHEKTPVSDRVTKCCTESLVNRRPCFSALEVDETYPVK 500
501 EFIADVFFLFLWYICKMSEKQRQFAKQIALVELVKHKPKATKEQLKAVMDD 550
551 FAAFVEKCCKADDKETCFAEEGKLVAASQAALGL 585
```

### 1.3. Eingefügte Mutationen

In Tabelle 1 sind die in Chymo 1.1 eingefügten Mutationen zu sehen.

Tabelle 1: In Chymo 1.1 eingefügten Mutationen

33) Q → M	117) R → L	506) T → V	524) K → A
36) F → V	122) V → Y	508) T → L	527) T → L
37) E → Y	137) K → F	510) H → L	562) D → N
38) D → V	140) Y → I	511) A → W	564) K → Y
80) L → D	144) R → I	512) D → Y	565) E → Y
82) E → S	420) T → A	515) T → K	566) T → E
83) T → F	421) P → M	516) L → M	569) A → I
111) N → P	503) N → I	520) E → Q	570) E → R
114) R → M	505) E → D	523) I → F	573) K → L
116) V → W			

## 2. Chymo1.2

### 2.1. Originale Sequenz

Im Folgenden ist die originale Peptidsequenz von Albumin zu sehen. In Rot sind die auszutauschenden Aminosäuren markiert.

```
>1AO6_1|Chains A,B|SERUM ALBUMIN|Homo sapiens (9606)
001 DAHKSEVAHRFKDLGEENFKALVLIAFAQYLQQCPFEDHVKLVNEVTEFA 050
051 KTCVADESAENCDKSLHTLFGDKLCTVATLRETYGEMADCCAKQEPERNE 100
101 CFLQHKDDNPNLPRLVRPEVDVMCTAFHDNEETFLKKYLYEIARRHPYFY 150
151 APELLFFAKRYKAAFTECCQAADKACLLPKLDELRDEGKASSAKQRLKC 200
201 ASLQKFGERAFKAAVARLSQRFPKAEFAEVSKLVTDLTKVHTECCHGDL 250
251 LECADDRADLAKYICENQDSISSKLKECCEKPLEKSHCIAEVEVENDEMPA 300
301 DLPSLAADFVESKDVCKNYAEKDVFLGMFLYEYARRHPDYSVVLLRLA 350
351 KTYETTLEKCAAADPHECYAKVFDEFKPLVEEPQNLIKQNCELFEQLGE 400
401 YKFQNALLVRYTKVPQVSPTTLVEVSRNLGVGSKCCKHPEAKRMPCAE 450
451 DYLSVVLNQLCVLHEKTPVSDRVTKCTESLVNRRPCFSALEVDETYVPK 500
501 EFNAETFTFHADICTLSEEKERQIKQTALVELVKHKPKATKEQLKAVMD 550
551 FAAFVEKCCKADDKETCFAEEGKKLVASQAAGLG 585
```

### 2.2. Mutierte Sequenz

Im Folgenden ist die mutierte Peptidsequenz von Chymo1.2 zu sehen. In Grün sind die ausgetauschten Aminosäuren markiert.

```
>Chymo1.2
001 DAHKSEVAHRFKDLGEENFKALVLIAFAQYLQYCPFTQHLRLVLEVTEFA 050
051 KTCVADESAENCDKSLHTLFGDKLCLIAPLRYAMEMADCCAKQEPERNE 100
101 CFLQHKDDNPQLPKLVRLPVDVMCEEFHMDEEEFLLIYLYLIARRHPYFY 150
151 APELLFFAKRYKAAFTECCQAADKACLLPKLDELRDEGKASSAKQRLKC 200
201 ASLQKFGERAFKAAVARLSQRFPKAEFAEVSKLVTDLTKVHTECCHGDL 250
251 LECADDRADLAKYICENQDSISSKLKECCEKPLEKSHCIAEVEVENDEMPA 300
301 DLPSLAADFVESKDVCKNYAEKDVFLGMFLYEYARRHPDYSVVLLRLA 350
351 KTYETTLEKCAAADPHECYAKVFDEFKPLVEEPQNLIKQNCELFEQLGE 400
401 YKFQNALLVRYTKVPQVSPTTLVEVSRNLGVGSKCCKHPEAKRMPCAE 450
451 DYLSVVLNQLCVLHEKTPVSDRVTKCTESLVNRRPCFSALEVDETYVPK 500
501 EFNAETFTFHADICTLSEEKERQIKQTALVELVKHKPKATKEQLKAVMD 550
551 FAAFVEKCCKADDKETCFAEEGKKLVASQAAGLG 585
```

### 2.3. Eingefügte Mutationen

In Tabelle 2 sind die in Chymo1.2 eingefügten Mutationen dargestellt.

Tabelle 2: In Chymo1.2 eingefügte Mutationen.

33) Q → Y	82) E → Y	129) D → M
37) E → T	83) T → A	130) N → D
38) D → Q	84) Y → M	133) T → M
40) V → L	111) N → Q	136) K → L
41) K → R	114) R → K	137) K → I
44) N → L	118) P → L	141) E → L
76) T → L	119) E → P	512) D → E
77) V → I	125) T → E	515) T → D
79) T → P	126) A → E	

## 2.4. erstes Docking

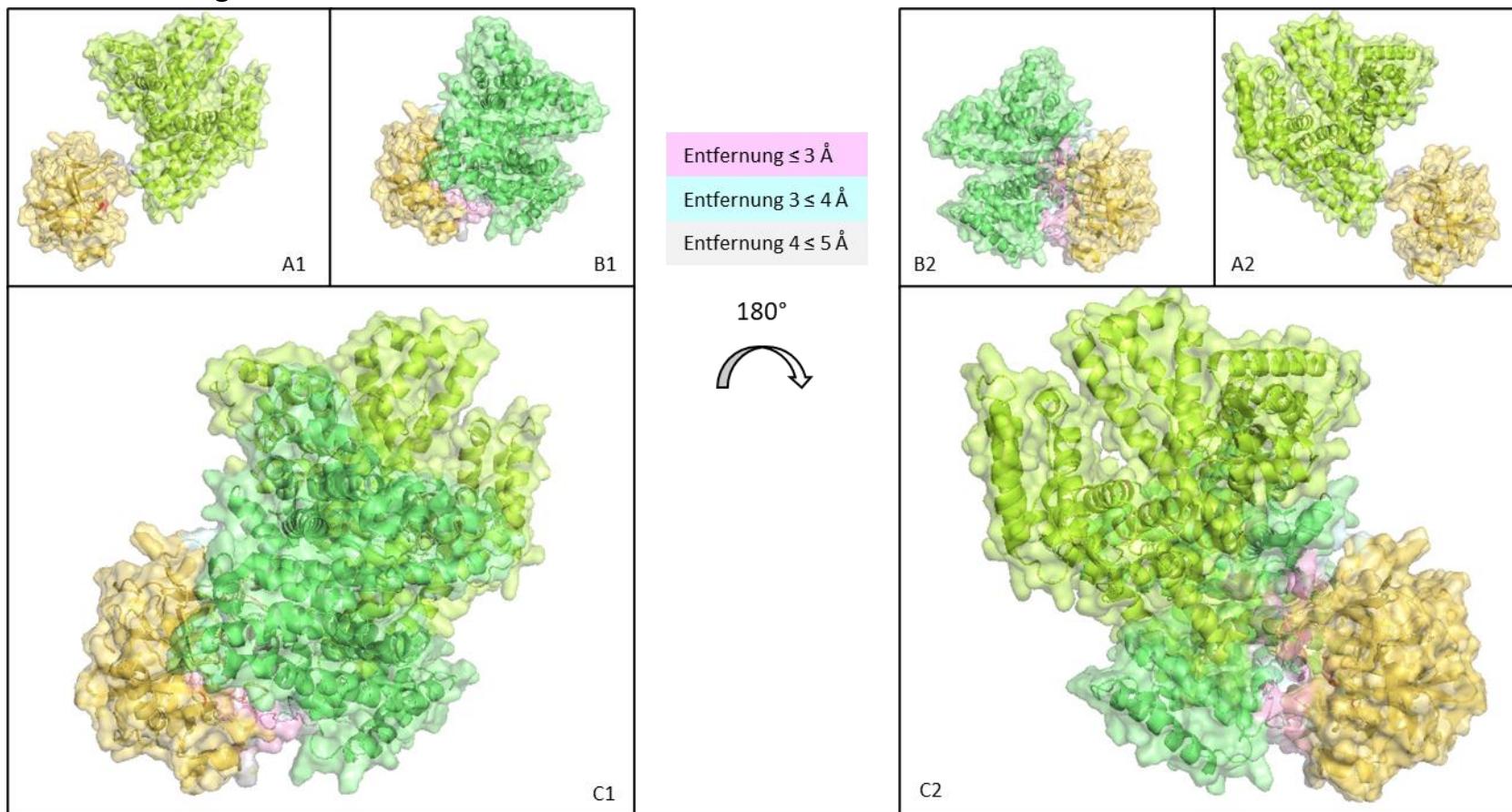


Abbildung 1: PyMol-Bilder der Anfangsstruktur und der Struktur nach dem ersten Docking.

In Grün ist das Albumin 1, in Gelborange das Chymotrypsin. Die Triade des Chymotrypsins ist in Rot dargestellt. Außerdem sind die Entfernungen zwischen Chymotrypsin und Albumin in unterschiedlichen Farben dargestellt. Entfernungen von maximal 3 Å sind in Pink, Entfernungen zwischen 3 und 4 Å in Türkisblau und Entfernungen zwischen 4 und 5 Å in Hellgrau eingefärbt. Unter 2 sind die jeweiligen Strukturen von 1 um 180° gedreht dargestellt. **A:** Zu sehen ist die Ausgangsstruktur. Die Triade ist noch gut zu sehen. **B:** Zu sehen ist die Struktur nach dem ersten Docking. Das Albumin ist näher in die Tasche des Chymotrypsin gerückt und verdeckt teilweise die Triade. **C:** Zu sehen sind die beiden überlagerten Strukturen. Eine deutlich eingefügte Rotation im Albumin ist zu erkennen.

## 2.5. erstes Design

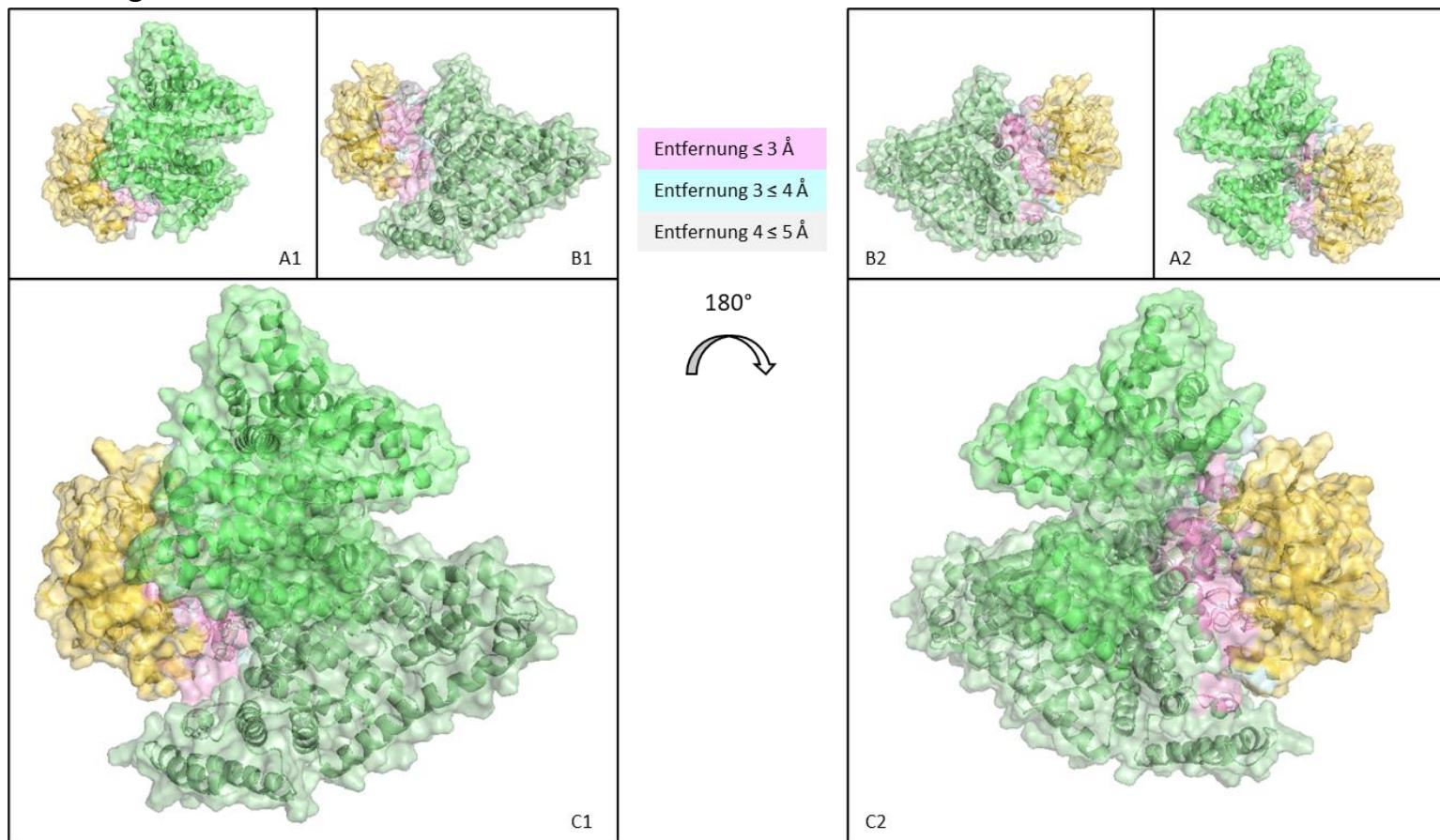


Abbildung 2: PyMol-Bilder der Struktur nach dem ersten Docking und nach dem ersten Design.

In Grün ist das Albumin 1, in Gelborange das Chymotrypsin. Die Triade des Chymotrypsins ist in Rot dargestellt. Außerdem sind die Entfernungen zwischen Chymotrypsin und Albumin in unterschiedlichen Farben dargestellt. Entfernungen von maximal 3 Å sind in Pink, Entfernungen zwischen 3 und 4 Å in Türkisblau und Entfernungen zwischen 4 und 5 Å in Hellgrau eingefärbt. Unter 2 sind die jeweiligen Strukturen von 1 um 180° gedreht dargestellt. **A:** Zu sehen ist die Struktur nach dem ersten Docking. Die Triade ist teilweise verdeckt. **B:** Zu sehen ist die Struktur nach dem ersten Design. Das Albumin ist näher in die Tasche des Chymotrypsin gerückt und verdeckt die Triade vollständig. **C:** Zu sehen sind die beiden überlagerten Strukturen. Das Albumin ist etwas mehr in die Tasche des Chymotrypsins gerutscht.

## 2.6. zweites Docking

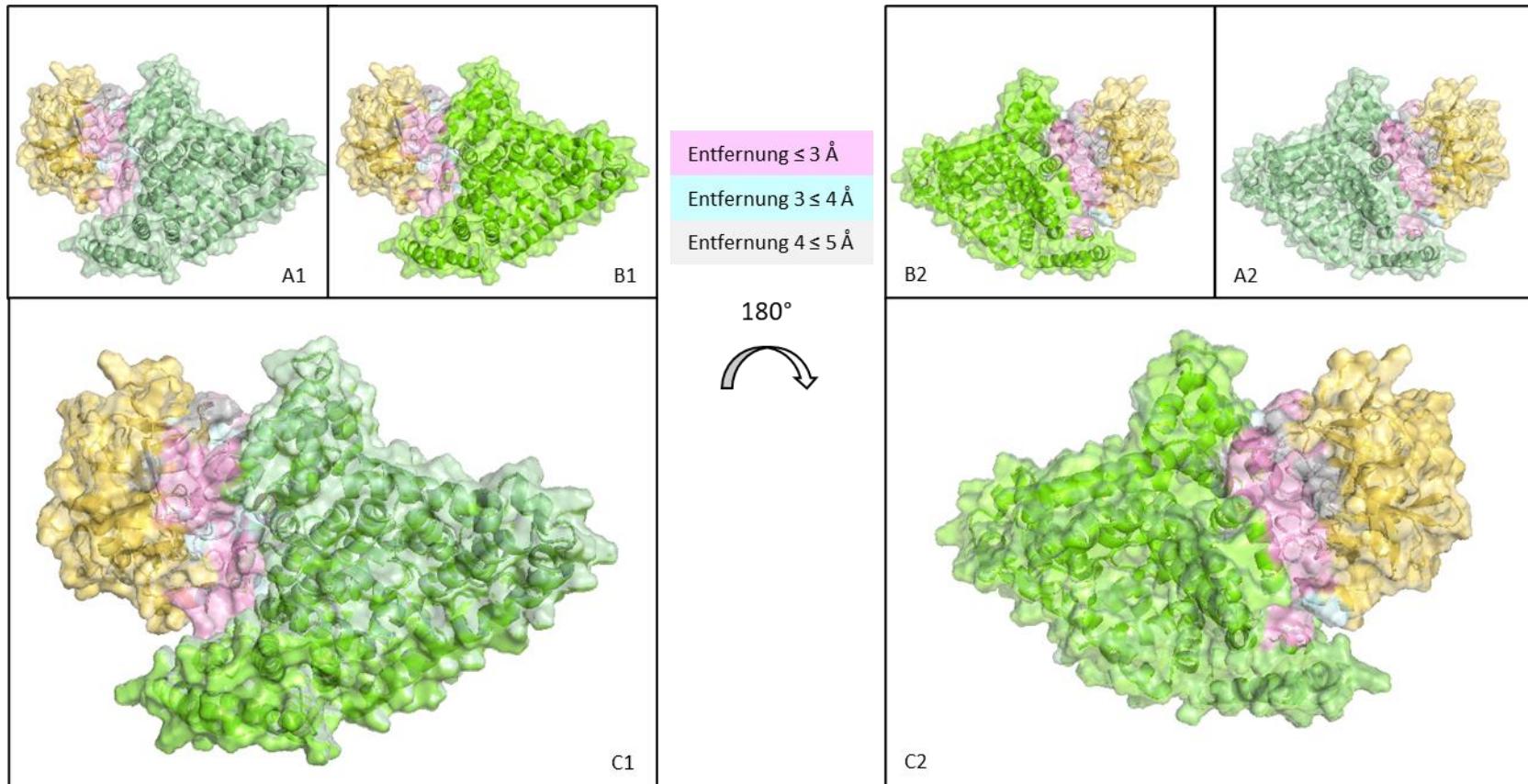


Abbildung 3: PyMol-Bilder der Struktur nach dem ersten Design und nach dem zweiten Docking.

In Grün ist das Albumin 1, in Gelborange das Chymotrypsin. Die Triade des Chymotrypsins ist in Rot dargestellt. Außerdem sind die Entfernungen zwischen Chymotrypsin und Albumin in unterschiedlichen Farben dargestellt. Entfernungen von maximal 3 Å sind in Pink, Entfernungen zwischen 3 und 4 Å in Türkisblau und Entfernungen zwischen 4 und 5 Å in Hellgrau eingefärbt. Unter **2** sind die jeweiligen Strukturen von **1** um 180° gedreht dargestellt. Dieser Schritt dient minimaler Anpassungen. **A:** Zu sehen ist die Struktur nach dem ersten Design. Die Triade ist gut verdeckt. **B:** Zu sehen ist die Struktur nach dem zweiten Docking. Die Triade ist weiterhin vollständig verdeckt. **C:** Zu sehen sind die beiden überlagerten Strukturen. Es ist eine minimale Änderung der Orientierung von Albumin erkennbar.

## 2.7. zweites Design

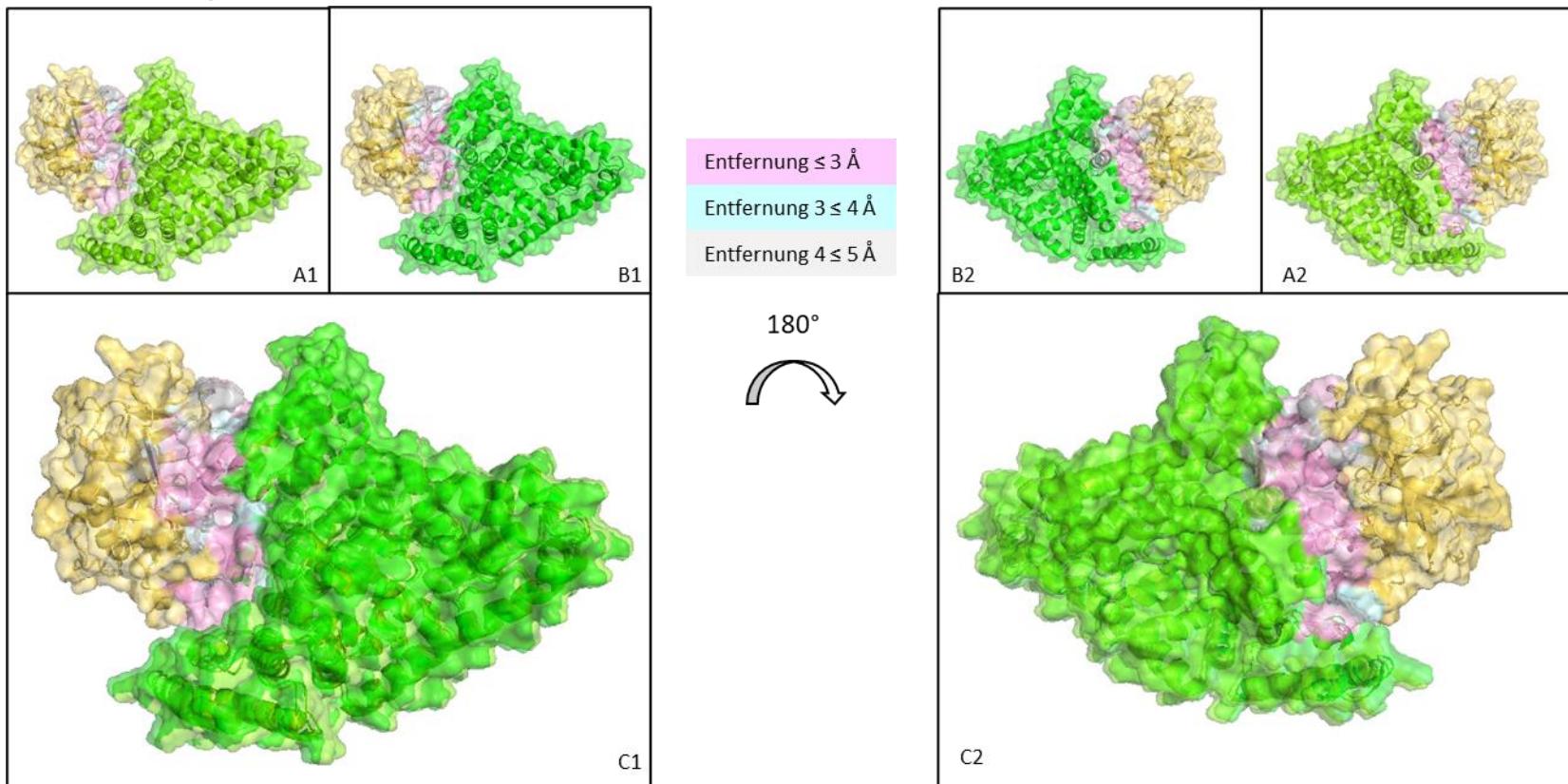


Abbildung 4: PyMol-Bilder der Struktur nach dem zweiten Docking und die finale Struktur nach dem zweiten Design.

In Grün ist das Albumin 1, in Gelborange das Chymotrypsin. Die Triade des Chymotrypsins ist in Rot dargestellt. Außerdem sind die Entfernungen zwischen Chymotrypsin und Albumin in unterschiedlichen Farben dargestellt. Entfernungen von maximal  $3 \text{ \AA}$  sind in Pink, Entfernungen zwischen  $3$  und  $4 \text{ \AA}$  in Türkisblau und Entfernungen zwischen  $4$  und  $5 \text{ \AA}$  in Hellgrau eingefärbt. Unter **2** sind die jeweiligen Strukturen von **1** um  $180^\circ$  gedreht dargestellt. Dieser Schritt dient ebenfalls minimaler Anpassungen. **A:** Zu sehen ist die Struktur nach dem zweiten Docking. Die Triade ist gut verdeckt. **B:** Zu sehen ist die Struktur nach dem zweiten Design. Die Triade ist weiterhin vollständig verdeckt. **C:** Zu sehen sind die beiden überlagerten Strukturen. Es ist eine minimale Änderung der Orientierung von Albumin erkennbar.

## 2.8. Final

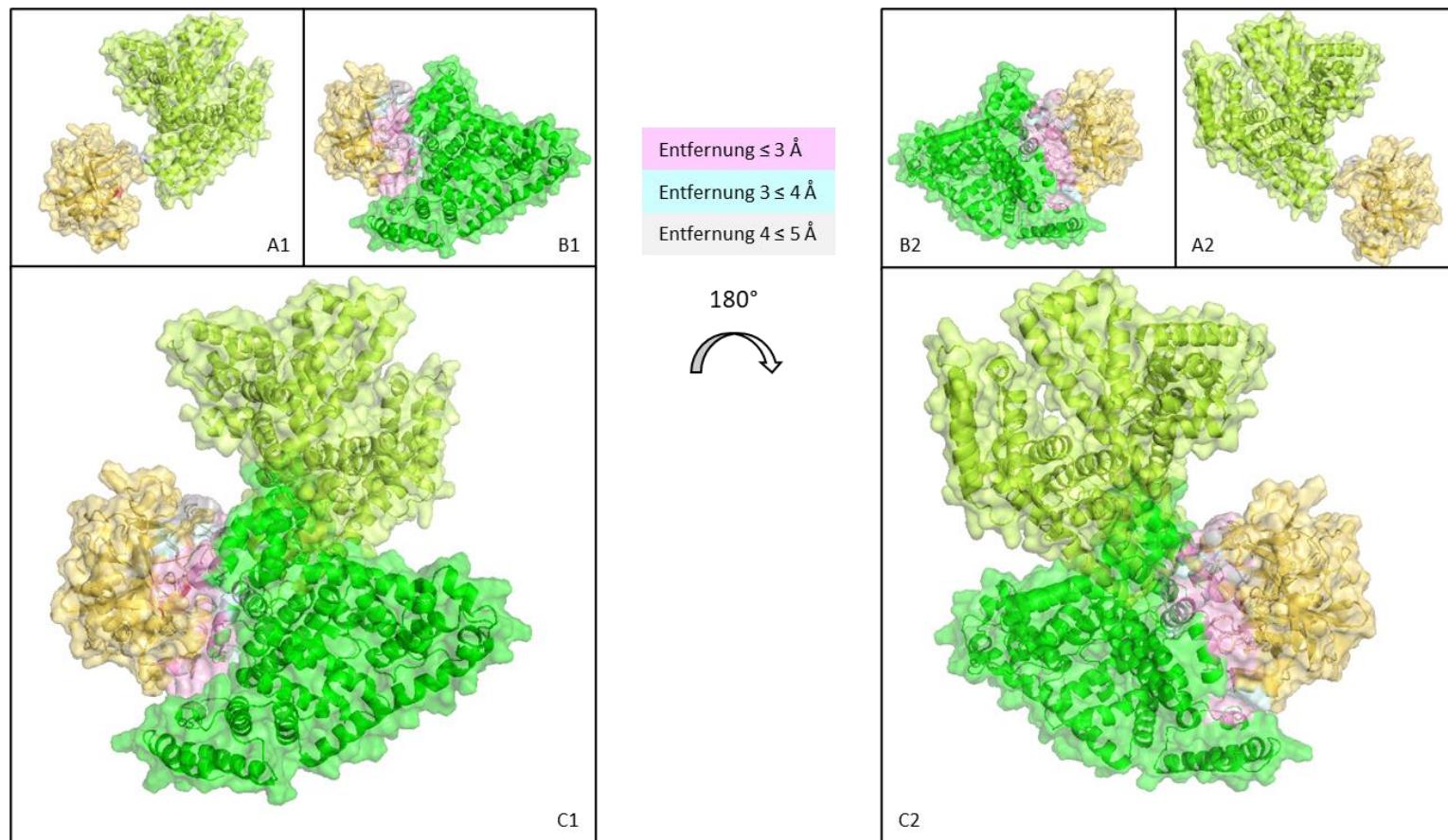


Abbildung 5: PyMol-Bilder der Ausgangsstruktur und die finale Struktur nach dem zweiten Design.

In Grün ist das Albumin 1, in Gelborange das Chymotrypsin. Die Triade des Chymotrypsins ist in Rot dargestellt. Außerdem sind die Entfernungen zwischen Chymotrypsin und Albumin in unterschiedlichen Farben dargestellt. Entfernungen von maximal 3 Å sind in Pink, Entfernungen zwischen 3 und 4 Å in Türkisblau und Entfernungen zwischen 4 und 5 Å in Hellgrau eingefärbt. Unter 2 sind die jeweiligen Strukturen von 1 um 180° gedreht dargestellt. Dieser Schritt dient ebenfalls minimaler Anpassungen. **A:** Zu sehen ist die Ausgangsstruktur. Die Triade ist gut ersichtlich. **B:** Zu sehen ist die finale Struktur nach dem zweiten Design. Durch das Anschmiegen des Albumins in die Tasche ist die Triade verdeckt. **C:** Zu sehen sind die beiden überlagerten Strukturen. Das Albumin ist hat sich in seiner ursprünglichen Orientierung komplett verändert.

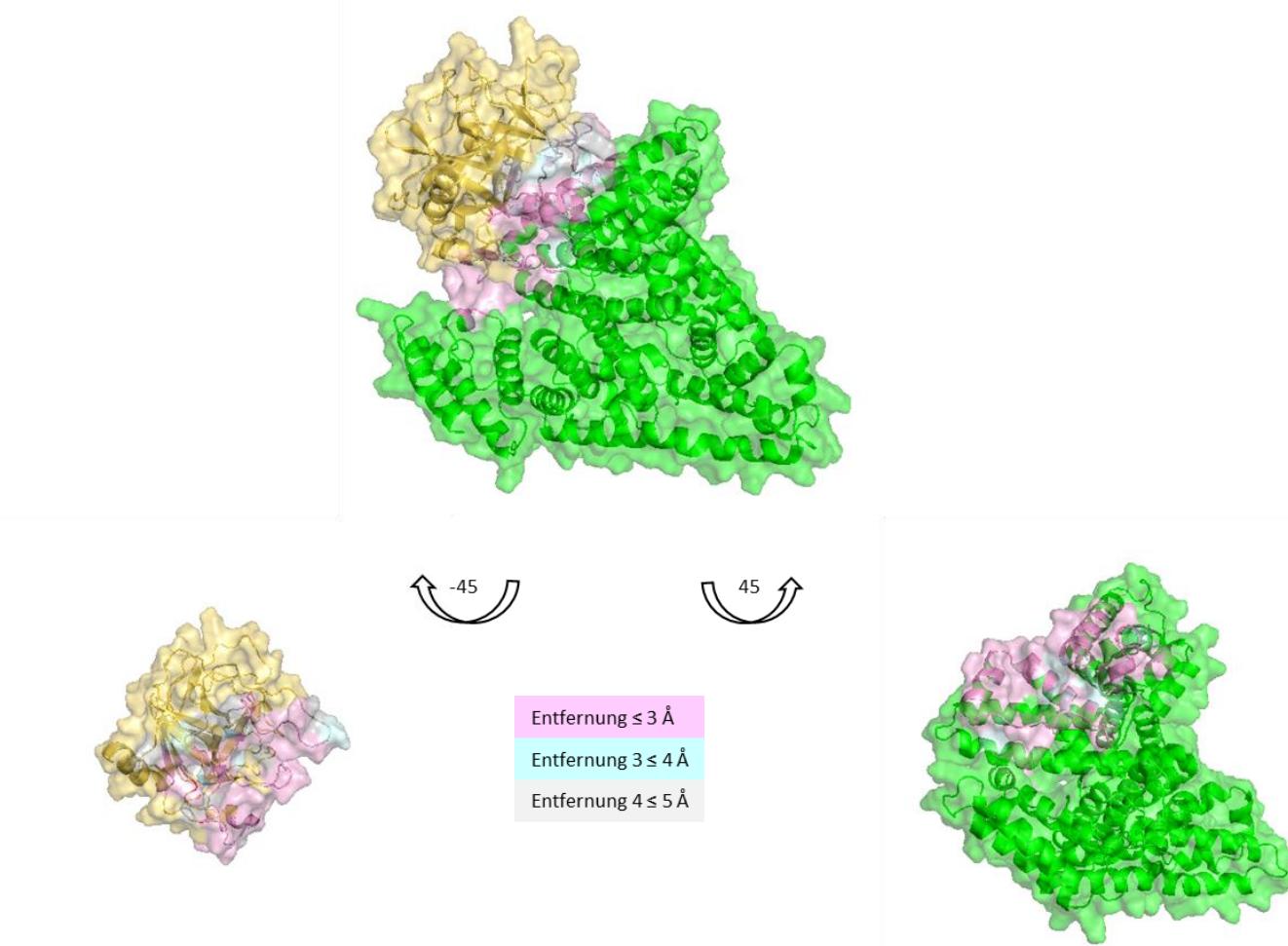


Abbildung 6: PyMol-Bilder der finalen Struktur.

In Grün ist das Albumin 1, in Gelborange das Chymotrypsin. Die Triade des Chymotrypsins ist in Rot dargestellt. Außerdem sind die Entfernungen zwischen Chymotrypsin und Albumin in unterschiedlichen Farben dargestellt. Entfernungen von maximal 3 Å sind in Pink, Entfernungen zwischen 3 und 4 Å in Türkisblau und Entfernungen zwischen 4 und 5 Å in Hellgrau eingefärbt. Die Proteine werden voneinander gelöst und um 45° gedreht. So ist die jeweilige Bindungsseite zu erkennen.

### 3. Chymo 1.3

#### 3.1. Originale Sequenz

Im Folgenden ist die originale Peptidsequenz von Albumin zu sehen. In Rot sind die auszutauschenden Aminosäuren markiert.

```
>1AO6_1|Chains A,B|SERUM ALBUMIN|Homo sapiens (9606)
001 DAHKSEVAHRFKDLGEENFKALVLIAFAQYLQQCPFEDHVKLNEVTEFA 050
051 KTCVADESAENCDKSLHTLFGDKLCTVATLRETYGEMADCCAKQEPERNE 100
101 CFLQHKKDDNPNLPRLVRPEVDVMCTAFHDNEETFLKKYLYEIARRHPYFY 150
151 APELLFFAKRYKAFTECCQAADKAACCLPKLDELRDEGKASSAKQRLKC 200
201 ASLQKFGERAFKAWAVARLSQRFPKAEFAEVSKLVTDLTkvHTECCHGDL 250
251 LECADDRADLAKYICENQDSISSKLKECCEKPLLEKSHCIAEVENDMPA 300
301 DLPSLAADFVESKDVKNYAEAKDVFLGMFLYEYARRHPDYSVVLRLA 350
351 KTYETTLEKCAAADPHECYAKVFEFKPLVEEPQNLIKQNCELFEQLGE 400
401 YKFQNALLVRYTKVPQVSTPTLVEVSRNLGKVGSKCKHPEAKRMPCAE 450
451 DYLSVVNLNQLCVLHEKTPVSDRVTKCCTESLVNRRPCFSALEVDETYVPK 500
501 EFNAETFTFHADICTLSEKERQIKKQTALVELVKHKPKATKEQLKAVMDD 550
551 FAAFVEKCCKADDKETCFAEEGKKLVAASQAALGL 585
```

#### 3.2. Mutierte Sequenz

Im Folgenden ist die mutierte Peptidsequenz von Chymo1.3 zu sehen. In Grün sind die ausgetauschten Aminosäuren markiert.

```
>Chymo1.3
001 DAHKSEVAHRFKDLGEENFKALVLIAFAQYLQQCPFEDHVKLNEVTEFA 050
051 KTCVADESAENCDKSLHTLFGDKLCTVATLRETYGEMADCCALQEPARNE 100
101 CFLKHKKDDNPDLPRLVRPEVDVMCTAFHDNEETFLKKYLYEIARRHPYFY 150
151 APELLFFAKRYKAFTECCQAADKAACCLPKLDELRDEGKASSAKQRLKC 200
201 ASLLLQFGERTFKAWAVARLSQRFPKAEFAEVSKLVTDLTkvHTECCHGDL 250
251 LECADDRADLAKYICENQDSISSKLKECCEKPLLEKSHCIAEVENDMPA 300
301 DLPSLAADFVESKDVKNYAEAKDVFLGMFLYEYARRHPDYSVVLRLA 350
351 KTYETTLEKCAAADPHECYAKVFEFKPLVEEPQNLIKQNCELFEQLGE 400
401 YKFQNALLVRYTKVPQVPTPTLVEVSRNLGKVGSKCKHPEAKRMPCAE 450
451 DYLSVVNLNQLCVLHLKFPVSYLVKFCCFDLSVNRRPCFSALDVLPWMQPE 500
501 EFNAETFTFHADICTLSEKERQIKKQTALVELVKHKPKATKEQLKAVMDD 550
551 FAAFVEKCCKADDKETCFAEEGKKLVAASQAALGL 585
```

#### 3.3. eingefügte Mutationen

In Tabelle 3 sind die in Chymo1.3 eingefügten Mutationen dargestellt.

Tabelle 3: in Chymo 1.3 eingefügte Mutationen.

93) K → L	474) T → K
97) E → A	475) K → F
104) Q → K	478) T → F
111) N → D	479) E → D
204) Q → L	492) E → D
205) K → Q	494) D → L
210) A → T	495) E → P
419) S → P	496) T → W
465) E → L	497) Y → M
467) T → F	498) V → Q
471) D → Y	500) K → E
472) R → L	474) T → K

### 3.4. erstes Docking

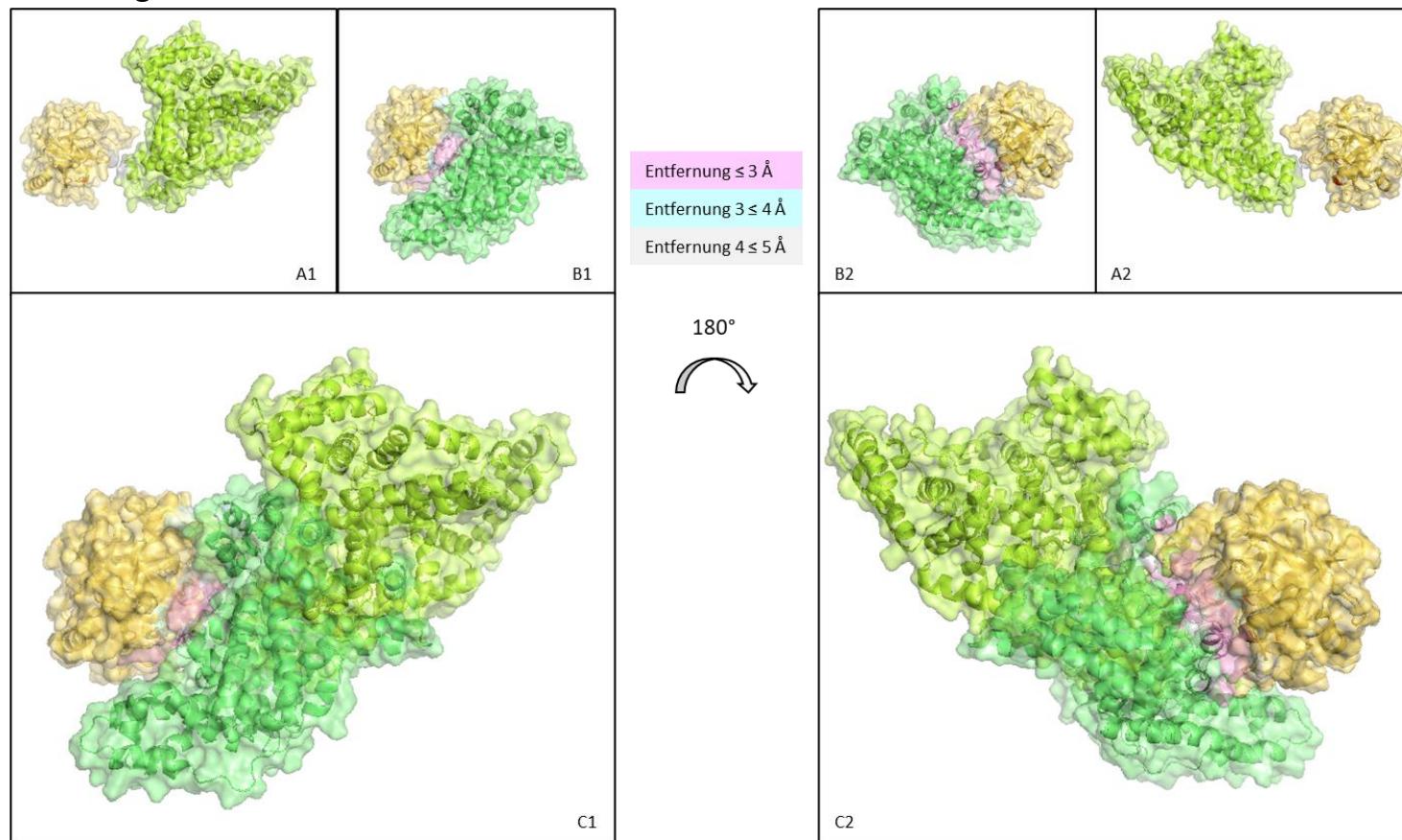


Abbildung 7: PyMol-Bilder der Anfangsstruktur und der Struktur nach dem ersten Docking.

In Grün ist das Albumin 1, in Gelborange das Chymotrypsin. Die Triade des Chymotrypsins ist in Rot dargestellt. Außerdem sind die Entferungen zwischen Chymotrypsin und Albumin in unterschiedlichen Farben dargestellt. Entferungen von maximal 3 Å sind in Pink, Entfernungen zwischen 3 und 4 Å in Türkisblau und Entfernungen zwischen 4 und 5 Å in Hellgrau eingefärbt. Unter 2 sind die jeweiligen Strukturen von 1 um 180° gedreht dargestellt. **A:** Zu sehen ist die Ausgangsstruktur. Die Triade ist noch gut zu sehen. **B:** Zu sehen ist die Struktur nach dem ersten Docking. Das Albumin ist näher in die Tasche des Chymotrypsin gerückt und verdeckt teilweise die Triade. **C:** Zu sehen sind die beiden überlagerten Strukturen. Eine deutlich eingefügte Rotation im Albumin ist zu erkennen.

### 3.5. erstes Design

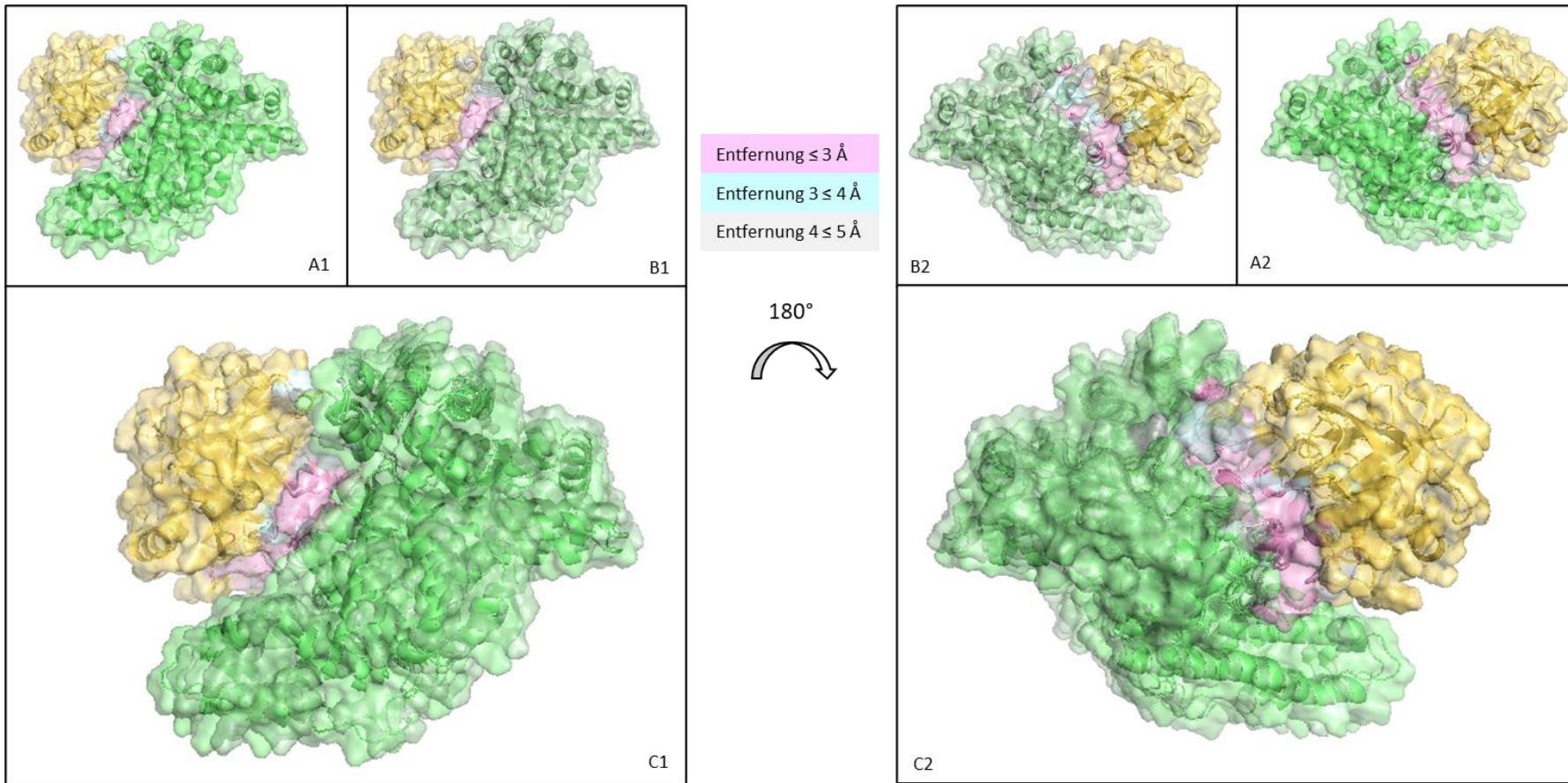


Abbildung 8: PyMol-Bilder der Struktur nach dem ersten Docking und nach dem ersten Design.

In Grün ist das Albumin 1, in Gelborange das Chymotrypsin. Die Triade des Chymotrypsins ist in Rot dargestellt. Außerdem sind die Entfernungen zwischen Chymotrypsin und Albumin in unterschiedlichen Farben dargestellt. Entfernungen von maximal 3 Å sind in Pink, Entfernungen zwischen 3 und 4 Å in Türkisblau und Entfernungen zwischen 4 und 5 Å in Hellgrau eingefärbt. Unter 2 sind die jeweiligen Strukturen von 1 um 180° gedreht dargestellt. **A:** Zu sehen ist die Struktur nach dem ersten Docking. Die Triade ist teilweise verdeckt. **B:** Zu sehen ist die Struktur nach dem ersten Design. Das Albumin ist näher in die Tasche des Chymotrypsin gerückt und verdeckt die Triade vollständig. **C:** Zu sehen sind die beiden überlagerten Strukturen. Das Albumin ist etwas mehr in die Tasche des Chymotrypsins gerutscht.

### 3.6. zweites Docking

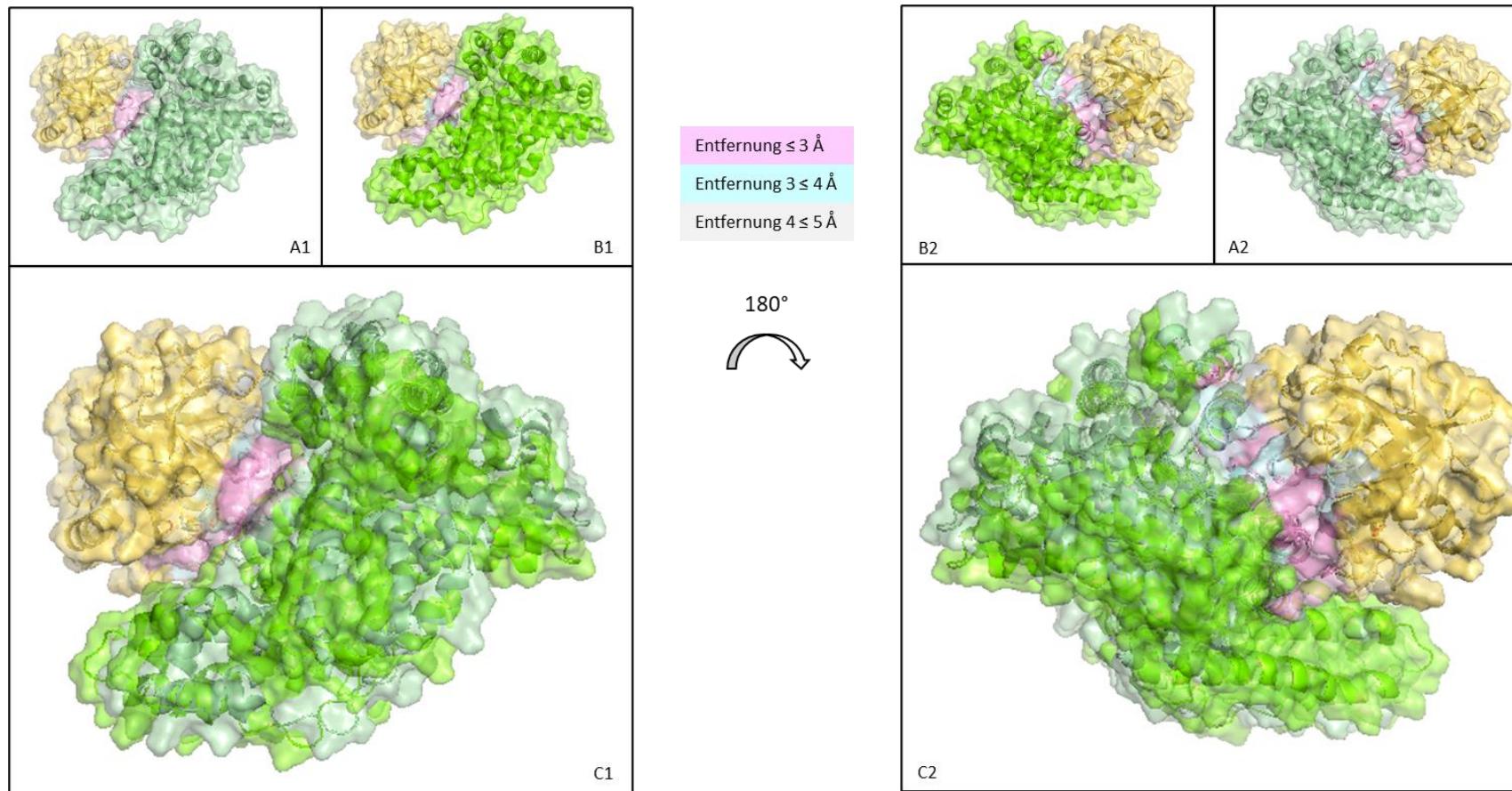


Abbildung 9: PyMol-Bilder der Struktur nach dem ersten Design und nach dem zweiten Docking.

In Grün ist das Albumin 1, in Gelborange das Chymotrypsin. Die Triade des Chymotrypsins ist in Rot dargestellt. Außerdem sind die Entfernungen zwischen Chymotrypsin und Albumin in unterschiedlichen Farben dargestellt. Entfernungen von maximal 3 Å sind in Pink, Entfernungen zwischen 3 und 4 Å in Türkisblau und Entfernungen zwischen 4 und 5 Å in Hellgrau eingefärbt. Unter 2 sind die jeweiligen Strukturen von 1 um 180° gedreht dargestellt. Dieser Schritt dient minimaler Anpassungen. **A:** Zu sehen ist die Struktur nach dem ersten Design. Die Triade ist gut verdeckt. **B:** Zu sehen ist die Struktur nach dem zweiten Docking. Die Triade ist weiterhin vollständig verdeckt. **C:** Zu sehen sind die beiden überlagerten Strukturen. Es ist eine minimale Änderung der Orientierung von Albumin erkennbar.

### 3.7. zweites Design

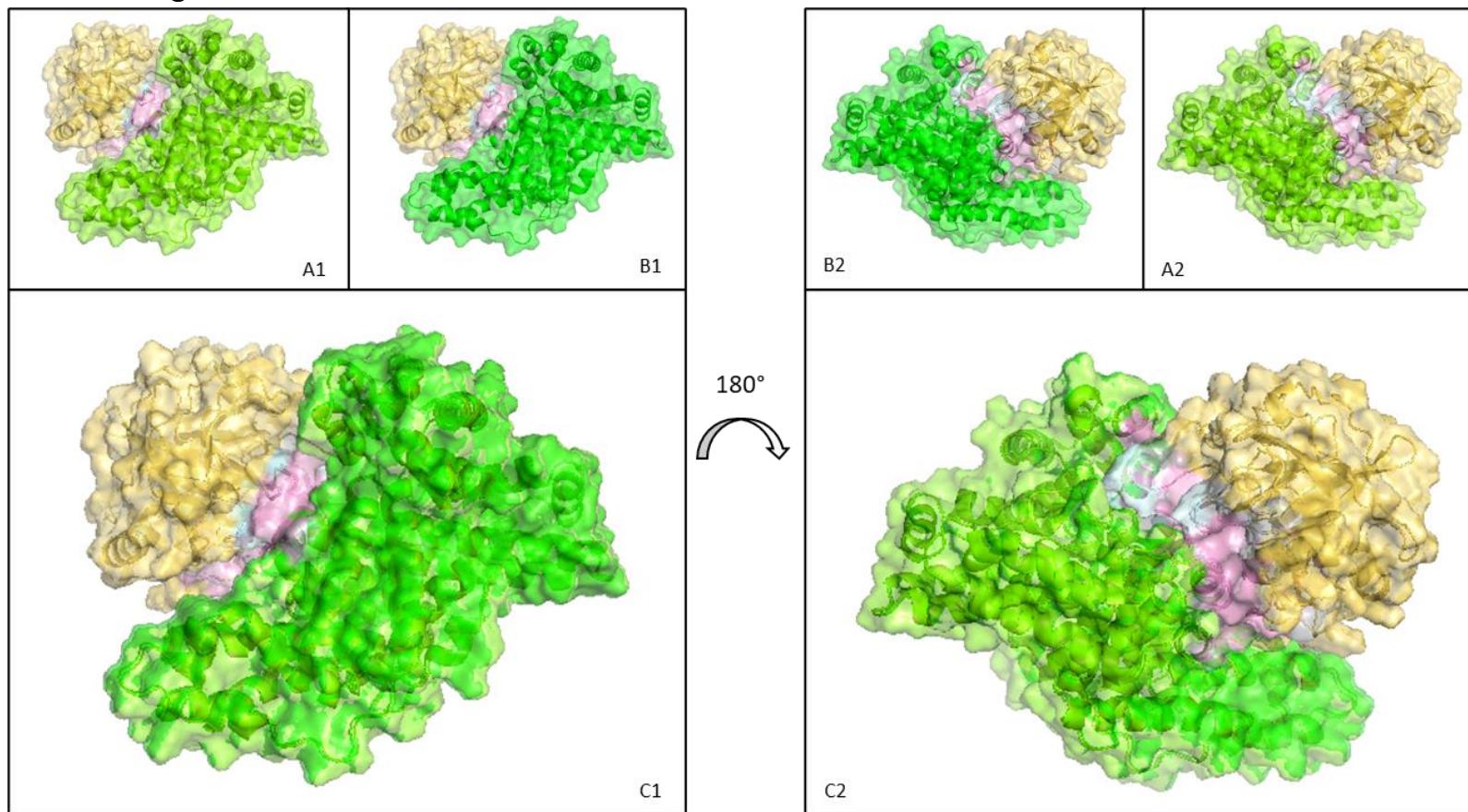


Abbildung 10: PyMol-Bilder der Struktur nach dem zweiten Docking und die finale Struktur nach dem zweiten Design.

In Grün ist das Albumin 1, in Gelborange das Chymotrypsin. Die Triade des Chymotrypsins ist in Rot dargestellt. Außerdem sind die Entferungen zwischen Chymotrypsin und Albumin in unterschiedlichen Farben dargestellt. Entferungen von maximal 3 Å sind in Pink, Entferungen zwischen 3 und 4 Å in Türkisblau und Entferungen zwischen 4 und 5 Å in Hellgrau eingefärbt. Unter **2** sind die jeweiligen Strukturen von **1** um 180° gedreht dargestellt. Dieser Schritt dient ebenfalls minimaler Anpassungen. **A:** Zu sehen ist die Struktur nach zweitem Docking. Die Triade ist gut verdeckt. **B:** Zu sehen ist die Struktur nach dem zweiten Design. Die Triade ist weiterhin vollständig verdeckt. **C:** Zu sehen sind die beiden überlagerten Strukturen. Es ist eine minimale Änderung der Orientierung von Albumin erkennbar.

### 3.8. Final

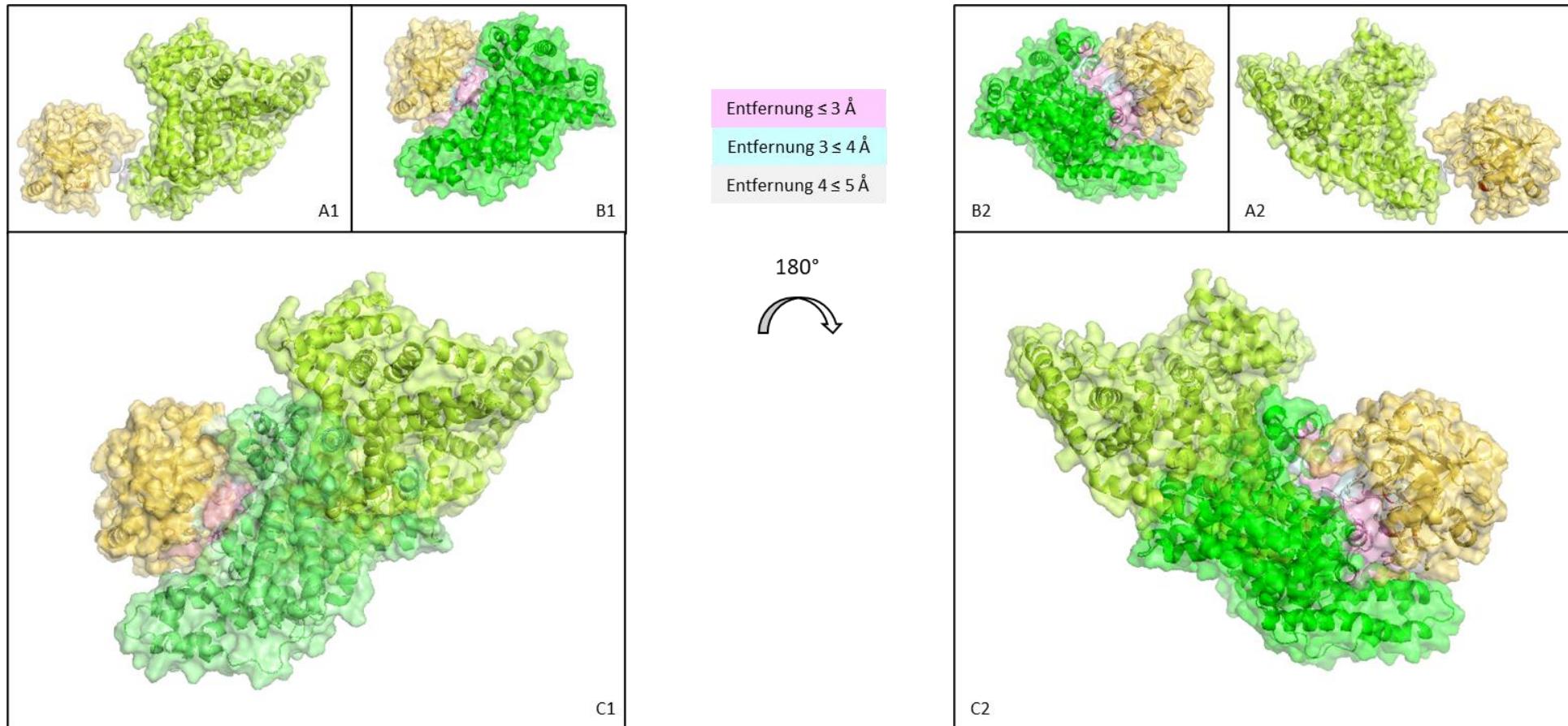


Abbildung 11: PyMol-Bilder der Ausgangsstruktur und die finale Struktur nach dem zweiten Design.

In Grün ist das Albumin 1, in Gelborange das Chymotrypsin. Die Triade des Chymotrypsins ist in Rot dargestellt. Außerdem sind die Entfernungen zwischen Chymotrypsin und Albumin in unterschiedlichen Farben dargestellt. Entfernungen von maximal  $3 \text{ \AA}$  sind in Pink, Entfernungen zwischen  $3$  und  $4 \text{ \AA}$  in Türkisblau und Entfernungen zwischen  $4$  und  $5 \text{ \AA}$  in Hellgrau eingefärbt. Unter **2** sind die jeweiligen Strukturen von **1** um  $180^\circ$  gedreht dargestellt. Dieser Schritt dient ebenfalls minimaler Anpassungen. **A:** Zu sehen ist die Ausgangsstruktur. Die Triade ist gut ersichtlich. **B:** Zu sehen ist die finale Struktur nach dem zweiten Design. Durch das Anschmiegen des Albumins in die Tasche ist die Triade verdeckt. **C:** Zu sehen sind die beiden überlagerten Strukturen. Das Albumin ist jetzt in seiner ursprünglichen Orientierung komplett verändert.

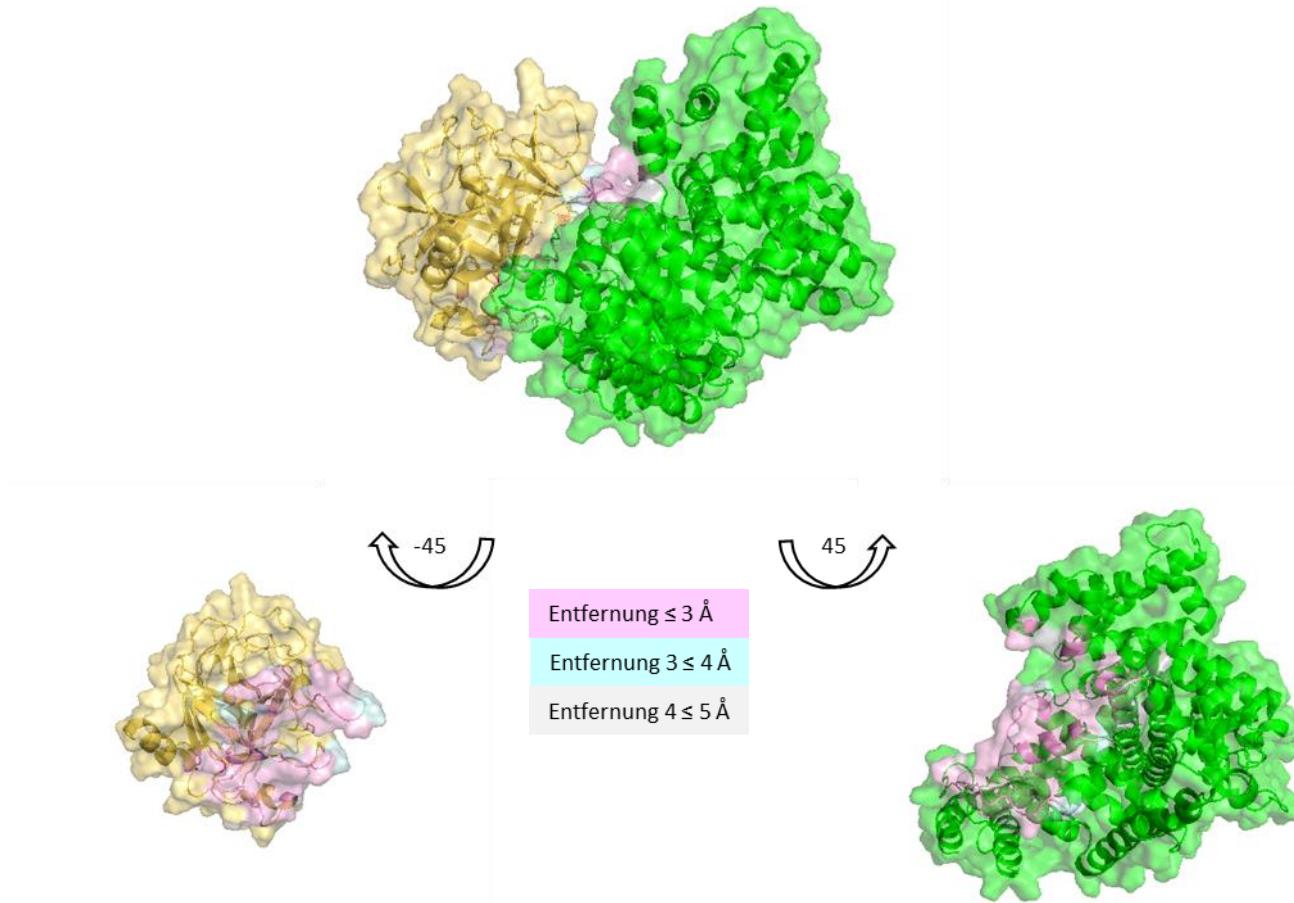


Abbildung 12: PyMol-Bilder der finalen Struktur.

In Grün ist das Albumin 1, in Gelborange das Chymotrypsin. Die Triade des Chymotrypsins ist in Rot dargestellt. Außerdem sind die Entfernungen zwischen Chymotrypsin und Albumin in unterschiedlichen Farben dargestellt. Entfernungen von maximal 3 Å sind in Pink, Entfernungen zwischen 3 und 4 Å in Türkisblau und Entfernungen zwischen 4 und 5 Å in Hellgrau eingefärbt. Die Proteine werden voneinander gelöst und um 45° gedreht. So ist die jeweilige Bindungsseite zu erkennen.

## 4. Chymo 2.1

### 4.1. Originale Sequenz

Im Folgenden ist die originale Peptidsequenz von Albumin zu sehen. In Rot sind die auszutauschenden Aminosäuren markiert.

```
>6HSC_1|Chains A, B|Serum albumin|Homo sapiens (9606)
001 DAHKSEVAHRFKDLGEENFKALVLIAFAQYLQQCPFEDHVKLNEVTEFA 050
051 KTCVADESAENCDKSLHTLFGDKLCTVATLRETYGEMADCCAKQEPPERNE 100
101 CFLQHKDDNPNLPRLVRPEVDVMCTAFHDNEETFLKKYLYEIARRHPYFY 150
151 APPELLFFAKRYKAAFTTECCQAADKAACLLPKLDELRDEGKASSAKQRLKC 200
201 ASLQKFGERAFKAWAVARLSQRFPKAEEFAEVSKLVTDLTKVHTECCHGDL 250
251 LECADDRADLAKYICENQDSISSKLKECCEKPLLEKSHCIAEVENDEMPA 300
301 DLPSLAADFVESKDVKNYAEAKDVFLGMFLYEYARRHPDYSVVLLRLA 350
351 KTYETTLEKCAAADPHECYAKVFDEFKPLVEEPQNLIKQNCELFEQLGE 400
401 YKFQNALLVRYTKVPQVSTPTLVEVSRNLGKVGSKCKHPEAKRMPCAE 450
451 DYLSVVLNQLCVLHEKTPVSDRVTKCCTESLVNRRPCFSALEVDETYVPK 500
501 EFNAETFTFHADICTLSEKERQIKKQTALVELVKHKPKATKEQLKAVMDD 550
551 FAAFVEKCKADDKETCFAEEGKKLVAASQAAALGL 585
```

### 4.2. Mutierte Sequenz

Im Folgenden ist die mutierte Peptidsequenz von Chymo2.1 zu sehen. In Grün sind die ausgetauschten Aminosäuren markiert.

```
>Chymo2.1
001 DAHKSEVAHRFKDLGEENFKALVLIAFAQYLQQCPFEDHVKLNEVTEFA 050
051 KTCVADESAENCDKSLHTLFGDKLCTVATLRETYGEMADCCAKQEPPERNE 100
101 CFLQHKDDNPNLPRLVRPEVDVMCTAFHDNEETFLKKYLYEIARRHPYFY 150
151 APPELLFFAKRYKAAFTTECCQAADKAACLLPKLDELRDEGKASSAKQRLKC 200
201 ASLQKFGERAFKAWAVARLSQRFPKAEEFAEVSKLVTDLTKVHTECCHGDL 250
251 LECADDRADLAKYICENQDSISSKLKECCEKPLLEKSHCIAEVENDEMPA 300
301 DLPSLAADFVESKDVKNYAEAKDVFLGMFLYEYARRHPDYSVVLLRLA 350
351 KTYETTLEKCAAADPHECYAKVFYEF DLLVTLPQLI IKLLCELFEELLSE 400
401 YLFQNWLVTYTKVPQVSTPTLVEVSRNLGKVGSKCKHPEAKRMPCAE 450
451 DYLSVVLNQLCVLHEKTPVSDRVTKCCTESLVNRRPCFWLLDVDETYVPK 500
501 EFNAETFTFHADICTLSEKERQIKKQTALVELVKHKPKATYEQLLAVMDD 550
551 FAAFVEKCKADDKETCFAEEGKKLVAASQAAALGL 585
```

### 4.3. Eingefügte Mutationen

In Tabelle 4 sind die in Chymo2.1 eingefügten Mutationen dargestellt.

Tabelle 4: in Chymo2.1 eingefügte Mutationen.

376) D → Y	399) L → L
379) K → D	400) G → S
380) P → L	403) K → L
383) E → T	407) A → W
384) E → L	411) R → T
388) N → L	490) S → W
389) L → I	491) A → L
392) Q → L	493) E → D
393) N → L	542) K → Y
398) Q → L	546) K → L

#### 4.4. erstes Docking

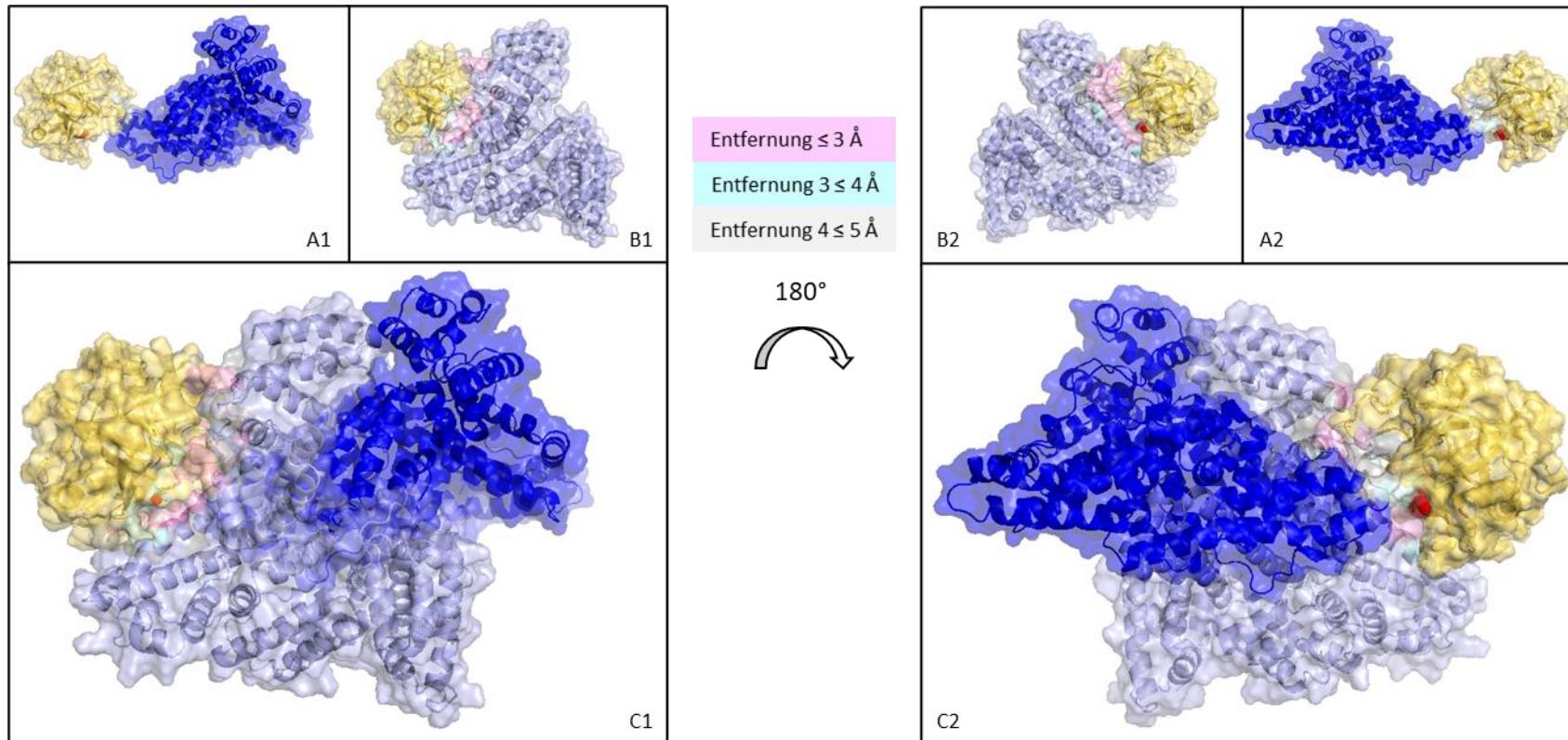


Abbildung 13: PyMol-Bilder der Anfangsstruktur und der Struktur nach dem ersten Docking.

In Blau ist das Albumin 2, in Gelborange das Chymotrypsin. Die Triade des Chymotrypsins ist in Rot dargestellt. Außerdem sind die Entferungen zwischen Chymotrypsin und Albumin in unterschiedlichen Farben dargestellt. Entfernungen von maximal 3 Å sind in Pink, Entfernungen zwischen 3 und 4 Å in Türkisblau und Entfernungen zwischen 4 und 5 Å in Hellgrau eingefärbt. Unter 2 sind die jeweiligen Strukturen von 1 um 180° gedreht dargestellt. **A:** Zu sehen ist die Ausgangsstruktur. Die Triade ist noch gut zu sehen. **B:** Zu sehen ist die Struktur nach dem ersten Docking. Das Albumin ist näher in die Tasche des Chymotrypsin gerückt und verdeckt teilweise die Triade. **C:** Zu sehen sind die beiden überlagerten Strukturen. Eine deutlich eingefügte Rotation im Albumin ist zu erkennen.

#### 4.5. erstes Design

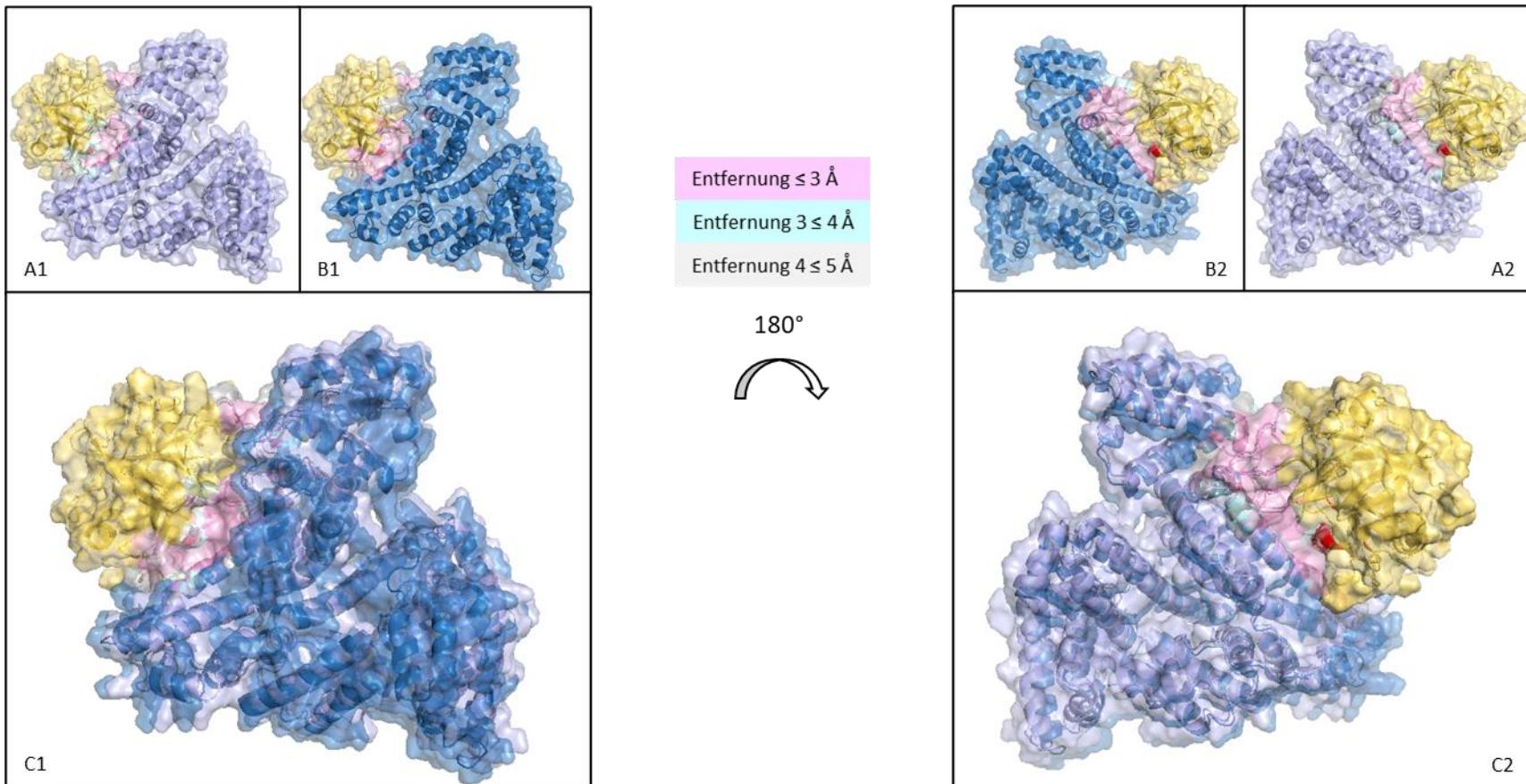


Abbildung 14: PyMol-Bilder der Struktur nach dem ersten Docking und nach dem ersten Design.

In Blau ist das Albumin 2, in Gelborange das Chymotrypsin. Die Triade des Chymotrypsins ist in Rot dargestellt. Außerdem sind die Entfernungen zwischen Chymotrypsin und Albumin in unterschiedlichen Farben dargestellt. Entfernungen von maximal 3 Å sind in Pink, Entfernungen zwischen 3 und 4 Å in Türkisblau und Entfernungen zwischen 4 und 5 Å in Hellgrau eingefärbt. Unter 2 sind die jeweiligen Strukturen von 1 um 180° gedreht dargestellt. **A:** Zu sehen ist die Struktur nach dem ersten Docking. Die Triade ist teilweise verdeckt. **B:** Zu sehen ist die Struktur nach dem ersten Design. Das Albumin ist näher in die Tasche des Chymotrypsin gerückt und verdeckt die Triade vollständig. **C:** Zu sehen sind die beiden überlagerten Strukturen. Das Albumin ist etwas mehr in die Tasche des Chymotrypsins gerutscht.

#### 4.6. zweites Docking

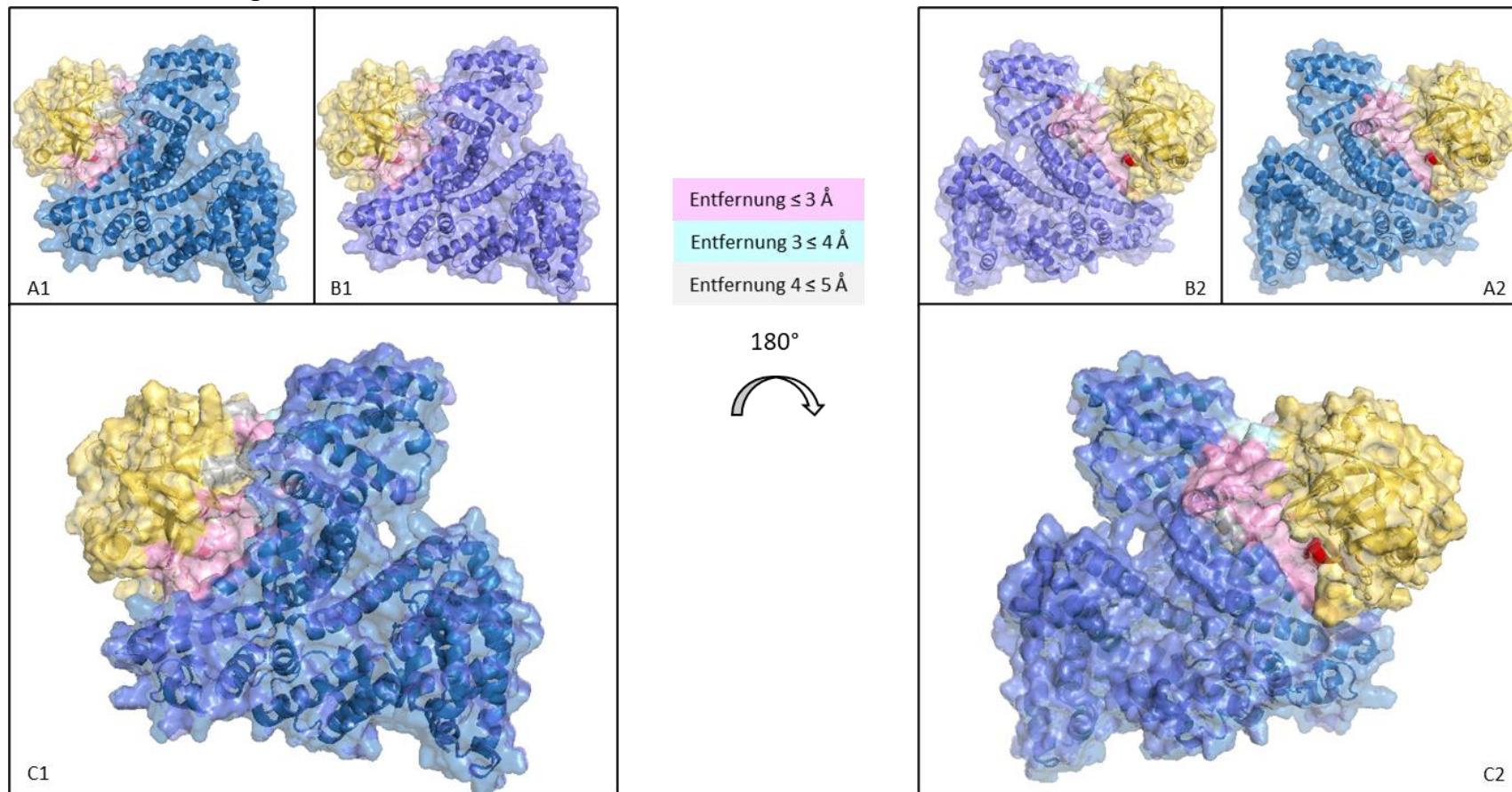


Abbildung 15: PyMol-Bilder der Struktur nach dem ersten Design und nach dem zweiten Docking.

In Blau ist das Albumin 2, in Gelborange das Chymotrypsin. Die Triade des Chymotrypsins ist in Rot dargestellt. Außerdem sind die Entfernungen zwischen Chymotrypsin und Albumin in unterschiedlichen Farben dargestellt. Entfernungen von maximal 3 Å sind in Pink, Entfernungen zwischen 3 und 4 Å in Türkisblau und Entfernungen zwischen 4 und 5 Å in Hellgrau eingefärbt. Unter **2** sind die jeweiligen Strukturen von **1** um 180° gedreht dargestellt. Dieser Schritt dient minimaler Anpassungen. **A:** Zu sehen ist die Struktur nach dem ersten Design. Die Triade ist gut verdeckt. **B:** Zu sehen ist die Struktur nach dem zweiten Docking. Die Triade ist weiterhin vollständig verdeckt. **C:** Zu sehen sind die beiden überlagerten Strukturen. Es ist eine minimale Änderung der Orientierung von Albumin erkennbar.

#### 4.7. zweites Design

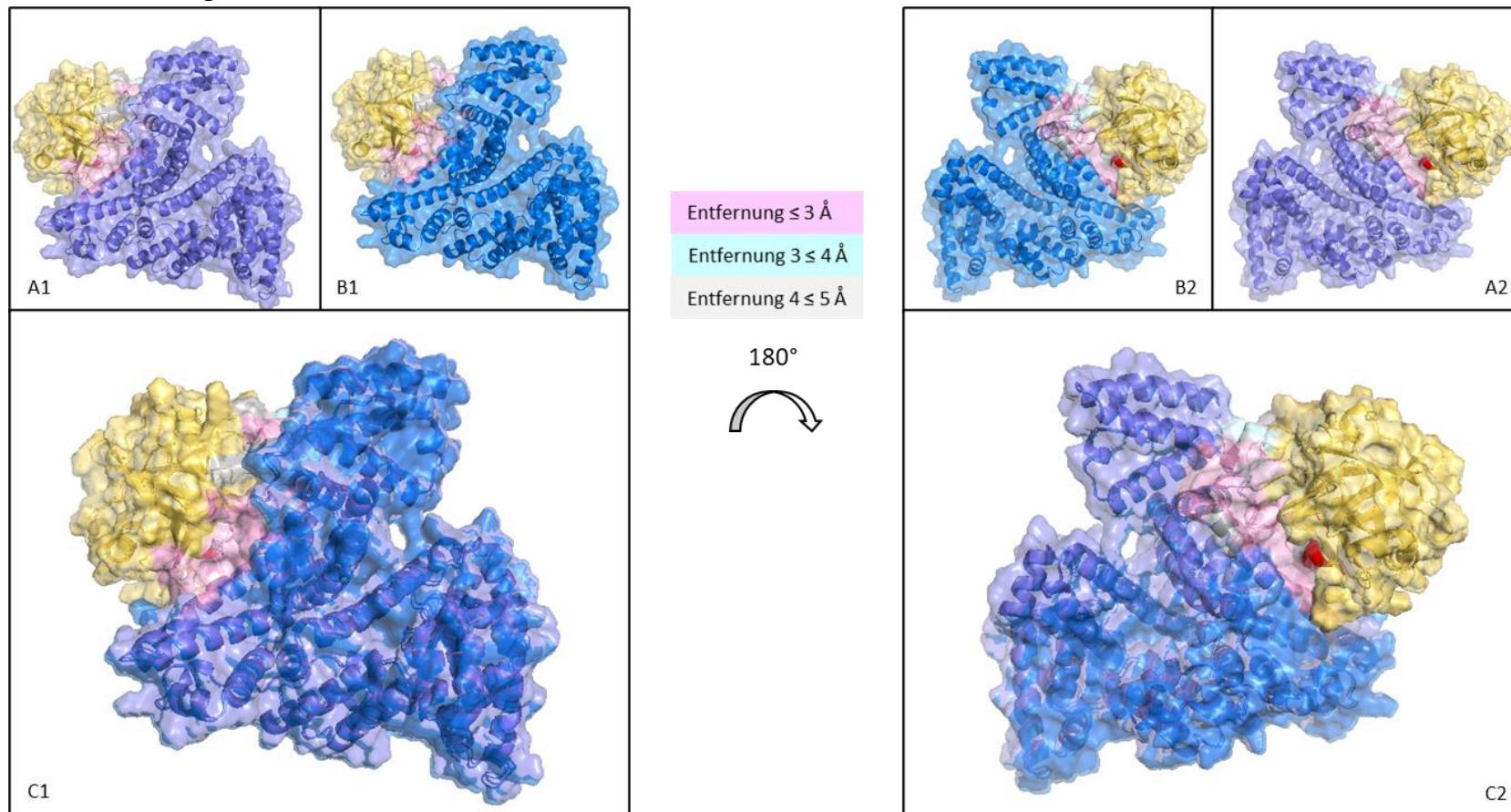


Abbildung 16: PyMol-Bilder der Struktur nach dem zweiten Docking und die finale Struktur nach dem zweiten Design.

In Blau ist das Albumin 2, in Gelborange das Chymotrypsin. Die Triade des Chymotrypsins ist in Rot dargestellt. Außerdem sind die Entfernungen zwischen Chymotrypsin und Albumin in unterschiedlichen Farben dargestellt. Entfernungen von maximal  $3 \text{ \AA}$  sind in Pink, Entfernungen zwischen  $3$  und  $4 \text{ \AA}$  in Türkisblau und Entfernungen zwischen  $4$  und  $5 \text{ \AA}$  in Hellgrau eingefärbt. Unter **2** sind die jeweiligen Strukturen von **1** um  $180^\circ$  gedreht dargestellt. Dieser Schritt dient ebenfalls minimaler Anpassungen. **A:** Zu sehen ist die Struktur nach dem zweiten Docking. Die Triade ist gut verdeckt. **B:** Zu sehen ist die Struktur nach dem zweiten Design. Die Triade ist weiterhin vollständig verdeckt. **C:** Zu sehen sind die beiden überlagerten Strukturen. Es ist eine minimale Änderung der Orientierung von Albumin erkennbar.

#### 4.8. Final

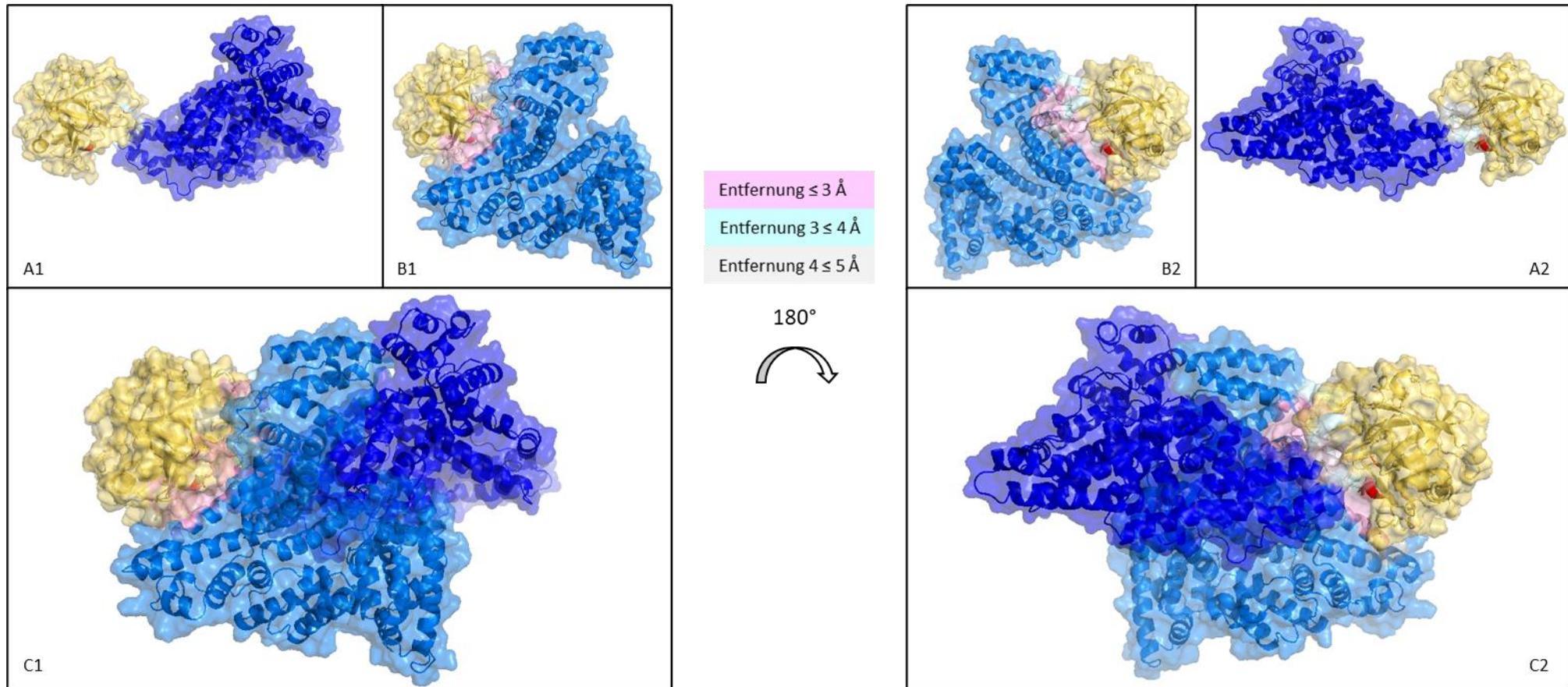


Abbildung 17: PyMol-Bilder der Ausgangsstruktur und die finale Struktur nach dem zweiten Design.

In Blau ist das Albumin 2, in Gelborange das Chymotrypsin. Die Triade des Chymotrypsins ist in Rot dargestellt. Außerdem sind die Entferungen zwischen Chymotrypsin und Albumin in unterschiedlichen Farben dargestellt. Entferungen von maximal  $3 \text{ \AA}$  sind in Pink, Entferungen zwischen  $3$  und  $4 \text{ \AA}$  in Türkisblau und Entferungen zwischen  $4$  und  $5 \text{ \AA}$  in Hellgrau eingefärbt. Unter **2** sind die jeweiligen Strukturen von **1** um  $180^\circ$  gedreht dargestellt. Dieser Schritt dient ebenfalls minimaler Anpassungen. **A:** Zu sehen ist die Ausgangsstruktur. Die Triade ist gut ersichtlich. **B:** Zu sehen ist die finale Struktur nach dem zweiten Design. Durch das Anschmiegen des Albumins in die Tasche ist die Triade verdeckt. **C:** Zu sehen sind die beiden überlagerten Strukturen. Das Albumin ist hat sich in seiner ursprünglichen Orientierung komplett verändert.

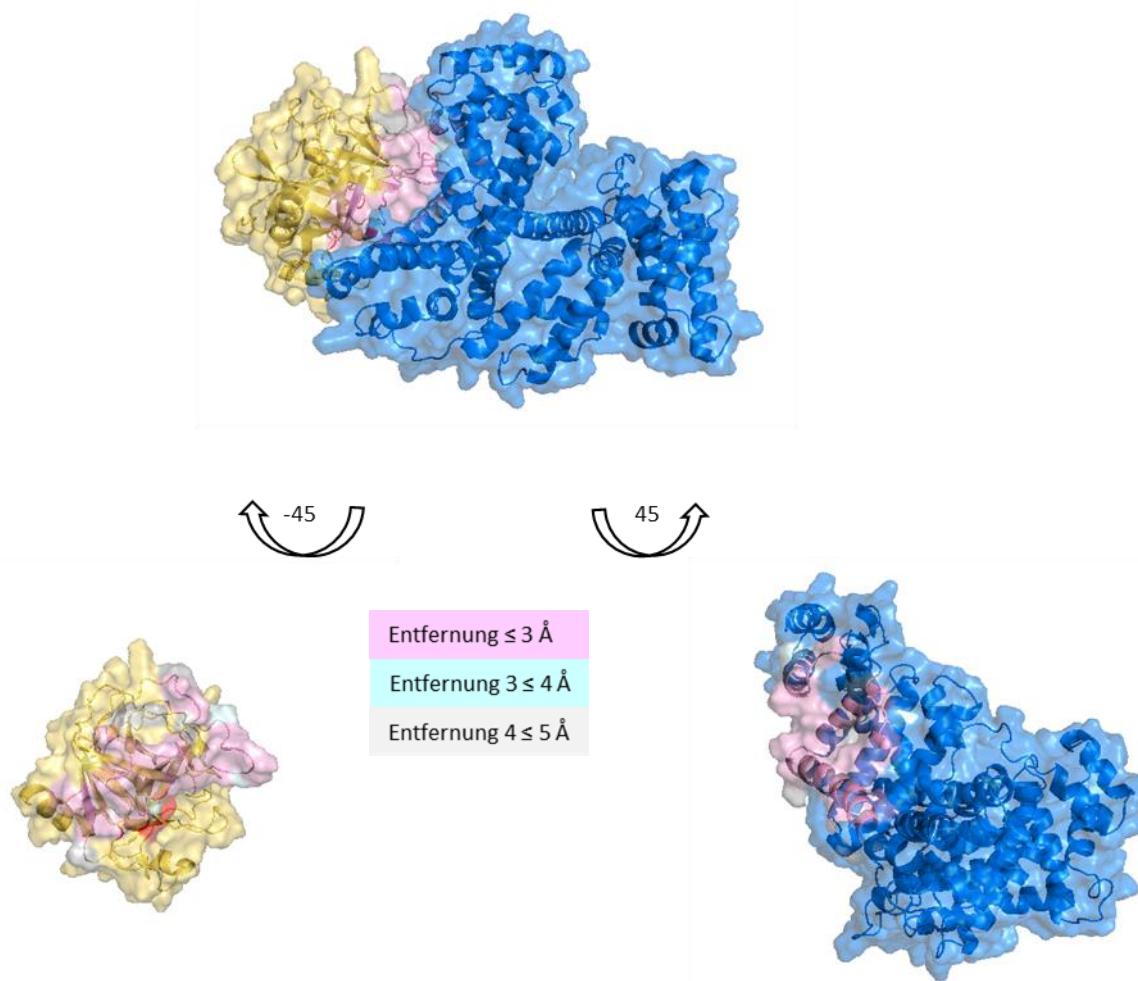


Abbildung 18: PyMol-Bilder der finalen Struktur.

In Blau ist das Albumin 2, in Gelborange das Chymotrypsin. Die Triade des Chymotrypsins ist in Rot dargestellt. Außerdem sind die Entfernungen zwischen Chymotrypsin und Albumin in unterschiedlichen Farben dargestellt. Entfernungen von maximal 3 Å sind in Pink, Entfernungen zwischen 3 und 4 Å in Türkisblau und Entfernungen zwischen 4 und 5 Å in Hellgrau eingefärbt. Die Proteine werden voneinander gelöst und um 45° gedreht. So ist die jeweilige Bindungsseite zu erkennen.

## 5. Chymo 2.2

### 5.1. Originale Sequenz

Im Folgenden ist die originale Peptidsequenz von Albumin zu sehen. In Rot sind die auszutauschenden Aminosäuren markiert.

```
>6HSC_1|Chains A, B|SERUM ALBUMIN|Homo sapiens (9606)
001 DAHKSEVAHRFKDLGEENFKALVLIAFAQYLQQCPFEDHVKLVNEVTEFA 050
051 KTCVADESAENCDKSLHTLFGDKLCTVATLRETYGEMADCCAKQEPERNE 100
101 CFLQHKDDNPNLPRLVRPEVDVMCTAFHDNEETFLKKYLYEIARRHPYFY 150
151 APPELLFFAKRYKAAFTECCQAADKAACLLPKLDELRDEGKASSAKQRLKC 200
201 ASLQKFGERAFKAWAVARLSQRFPKAEFAEVSKLVTDLTKVHTECCHGDL 250
251 LECADDRADLAKYICENQDSISSKLKECCEKPLEKSHCIAEVENDEMPA 300
301 DLPSLAADFVESKDVKNYAEAKDVFLGMFLYEYARRHPDYSVVLLLRLA 350
351 KTYETTLEKCAAADPHECYAKVFDEFKPLVEEPQNLIKQNCELFEQLGE 400
401 YKFQNALLVRYTKVPQVSTPTLVEVSRNLGKVGSKCCHPEAKRMPCAE 450
451 DYLSVVLNQLCVLHEKTPVSDRVTKCCTESLVNRRPCFSALEDETYVPK 500
501 EFNAETFTFHADICTLSEKERQIKKQTALVELVKHKPKATKEQLKAVMDD 550
551 FAAFVEKCCKADDKETCFAEEGKKLVAASQALGL 585
```

### 5.2. Mutierte Sequenz

Im Folgenden ist die mutierte Peptidsequenz von Chymo2.2 zu sehen. In Grün sind die ausgetauschten Aminosäuren markiert.

```
>Chymo2.2
001 DAHKSEVAHRFKDLGEENFKALVLIAFAQYLQMCPFTDHVKLVNEVTEFA 050
051 KTCVADESAENCDKSLHTLFGDKLCTVAHLRELYGEMADCCAKQEPERNE 100
101 CFLQHKDDNPILPQLFWPPVDWMCTEFHDNEETFLKKYLYEIARRHPYFY 150
151 APPELLFFAKRYKAAFTECCQAADKYACLLPKLLELRDEGKASSAKQRLKC 200
201 ASLQKFGERAFKAWAVARLSQRFPKAEFAEVSKLVTDLTKVHTECCHGDL 250
251 LECADDRADLAKYICENQDSISSKLKECCEKPLEKSHCIAEVENDEMPA 300
301 DLPSLAADFVESKDVKNYAEAKDVFLGMFLYEYARRHPDYSVVLLLRLA 350
351 KTYETTLEKCAAADPHECYAKVFDEFKPLVEEPQNLIKQNCELFEQLGE 400
401 YKFQNALLVRYTKVPQVPYTTLVEVSRNLGKVGSKCCHPEAKRMPCAE 450
451 DYLSVVLNQLCVLHEEFPVSDRVTKCCTESLVNRRPCFSALEDETYVPK 500
501 EFDASTFTFTAEICKLHEWIRQWLKQIALVELVKHKPKATKEQLKAVMDD 550
551 FAAFVEKCCKADDKETCFAEEGKKLVAASQALGL 585
```

### 5.3. Eingefügte Mutationen

In Tabelle 5 sind die in Chymo2.2 eingefügten Mutationen dargestellt.

Tabelle 5: in Chymo2.2 eingefügte Mutationen.

33) Q → M	126) A → E	510) H → T
37) E → T	175) A → Y	512) D → E
79) T → H	183) D → L	515) T → K
83) T → L	419) S → P	517) S → H
111) N → I	421) P → Y	519) K → W
114) R → Q	466) K → E	520) E → I
116) V → F	467) T → F	523) I → W
117) R → W	503) N → D	524) K → L
119) E → P	505) E → S	527) T → I
122) V → W		

## 5.4. erstes Docking

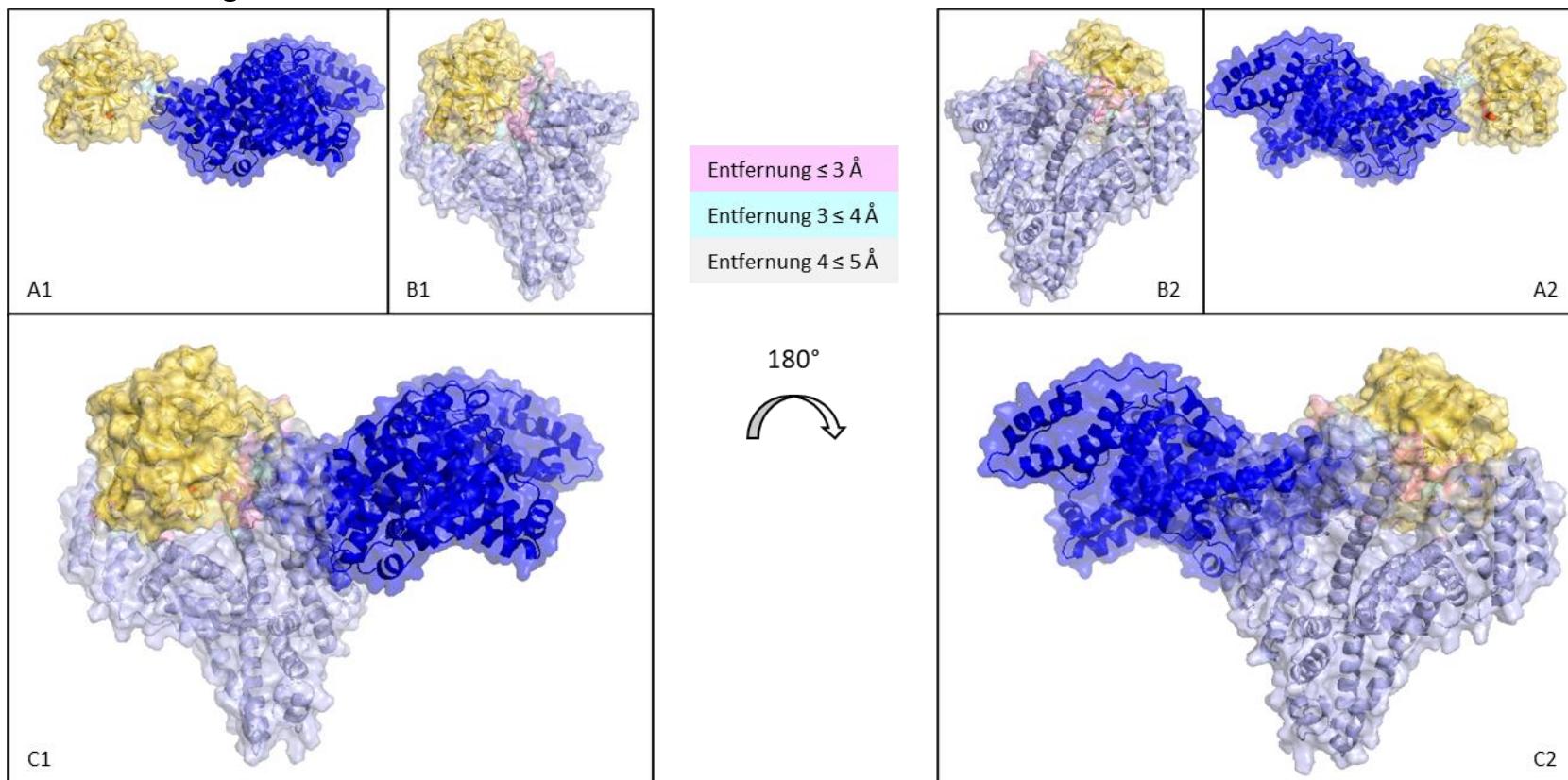


Abbildung 19: PyMol-Bilder der Anfangsstruktur und der Struktur nach dem ersten Docking.

In Blau ist das Albumin 2, in Gelborange das Chymotrypsin. Die Triade des Chymotrypsins ist in Rot dargestellt. Außerdem sind die Entferungen zwischen Chymotrypsin und Albumin in unterschiedlichen Farben dargestellt. Entfernungen von maximal 3 Å sind in Pink, Entfernungen zwischen 3 und 4 Å in Türkisblau und Entfernungen zwischen 4 und 5 Å in Hellgrau eingefärbt. Unter **2** sind die jeweiligen Strukturen von **1** um 180° gedreht dargestellt. **A:** Zu sehen ist die Ausgangsstruktur. Die Triade ist noch gut zu sehen. **B:** Zu sehen ist die Struktur nach dem ersten Docking. Das Albumin ist näher in die Tasche des Chymotrypsin gerückt und verdeckt teilweise die Triade. **C:** Zu sehen sind die beiden überlagerten Strukturen. Eine deutlich eingefügte Rotation im Albumin ist zu erkennen.

## 5.5. erstes Design

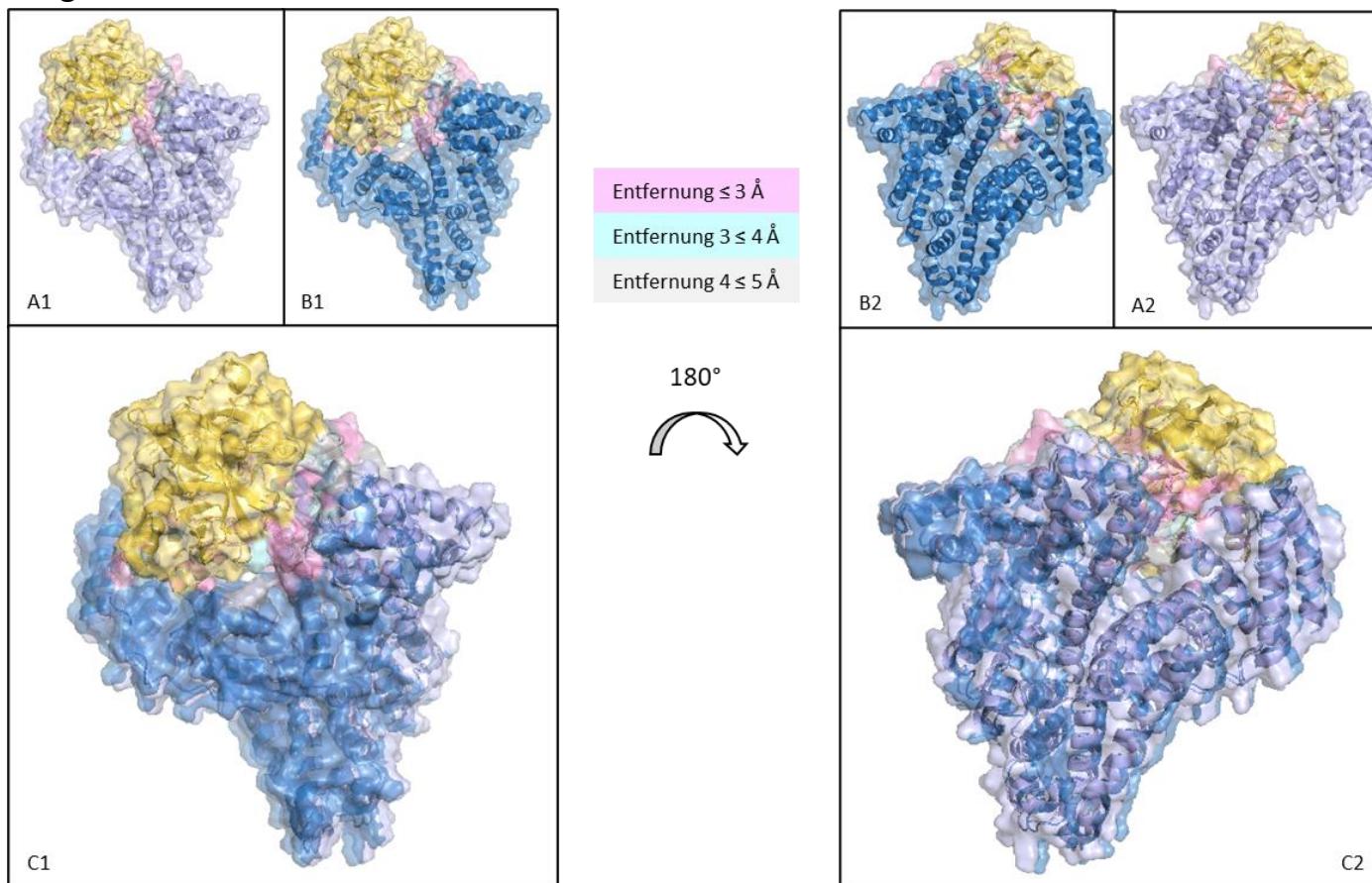


Abbildung 20: PyMol-Bilder der Struktur nach dem ersten Docking und nach dem ersten Design.

In Blau ist das Albumin 2, in Gelborange das Chymotrypsin. Die Triade des Chymotrypsins ist in Rot dargestellt. Außerdem sind die Entfernungen zwischen Chymotrypsin und Albumin in unterschiedlichen Farben dargestellt. Entfernungen von maximal 3 Å sind in Pink, Entfernungen zwischen 3 und 4 Å in Türkisblau und Entfernungen zwischen 4 und 5 Å in Hellgrau eingefärbt. Unter **2** sind die jeweiligen Strukturen von **1** um 180° gedreht dargestellt. **A:** Zu sehen ist die Struktur nach dem ersten Docking. Die Triade ist teilweise verdeckt. **B:** Zu sehen ist die Struktur nach dem ersten Design. Das Albumin ist näher in die Tasche des Chymotrypsin gerückt und verdeckt die Triade vollständig. **C:** Zu sehen sind die beiden überlagerten Strukturen. Das Albumin ist etwas mehr in die Tasche des Chymotrypsins gerutscht.

## 5.6. zweites Docking

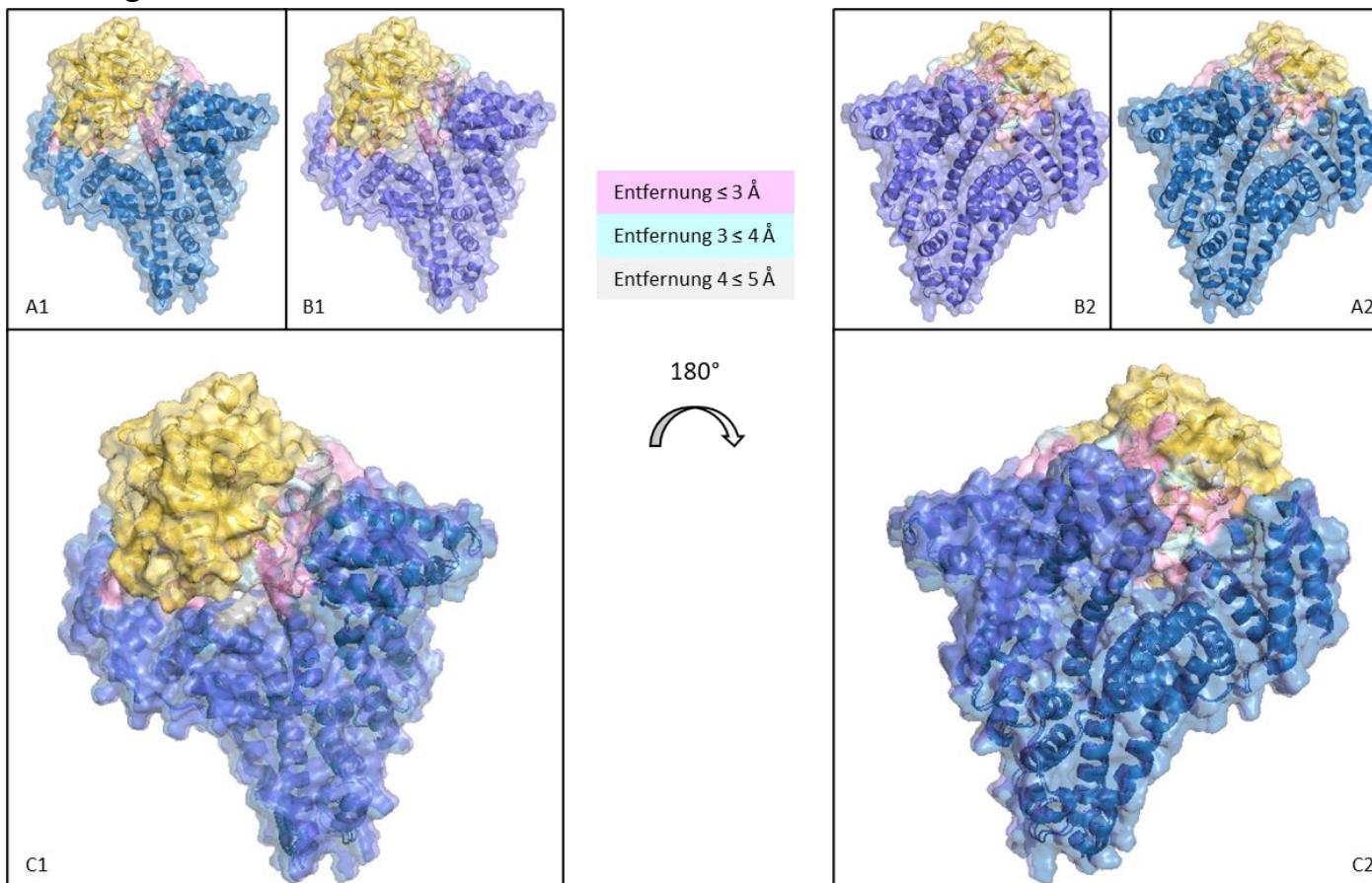


Abbildung 21: PyMol-Bilder der Struktur nach dem ersten Design und nach dem zweiten Docking.

In Blau ist das Albumin 2, in Gelborange das Chymotrypsin. Die Triade des Chymotrypsins ist in Rot dargestellt. Außerdem sind die Entfernungen zwischen Chymotrypsin und Albumin in unterschiedlichen Farben dargestellt. Entfernungen von maximal  $3 \text{ \AA}$  sind in Pink, Entfernungen zwischen  $3$  und  $4 \text{ \AA}$  in Türkisblau und Entfernungen zwischen  $4$  und  $5 \text{ \AA}$  in Hellgrau eingefärbt. Unter **2** sind die jeweiligen Strukturen von **1** um  $180^\circ$  gedreht dargestellt. Dieser Schritt dient minimaler Anpassungen. **A:** Zu sehen ist die Struktur nach dem ersten Design. Die Triade ist gut verdeckt. **B:** Zu sehen ist die Struktur nach dem zweiten Docking. Die Triade ist weiterhin vollständig verdeckt. **C:** Zu sehen sind die beiden überlagerten Strukturen. Es ist eine minimale Änderung der Orientierung von Albumin erkennbar.

## 5.7. zweites Design

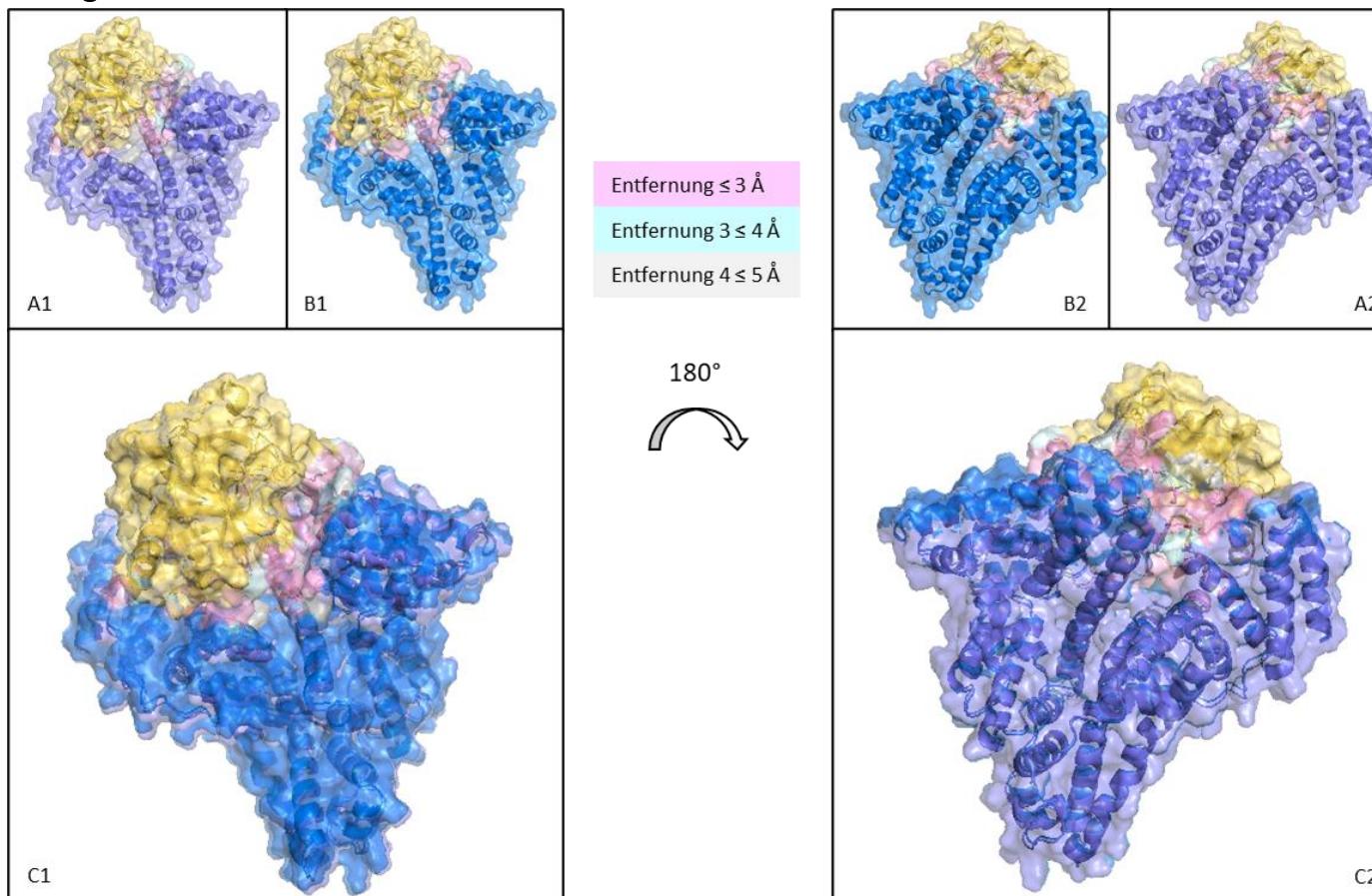


Abbildung 22: PyMol-Bilder der Struktur nach dem zweiten Docking und die finale Struktur nach dem zweiten Design.

In Blau ist das Albumin 2, in Gelborange das Chymotrypsin. Die Triade des Chymotrypsins ist in Rot dargestellt. Außerdem sind die Entferungen zwischen Chymotrypsin und Albumin in unterschiedlichen Farben dargestellt. Entfernungen von maximal  $3 \text{ \AA}$  sind in Pink, Entfernungen zwischen  $3$  und  $4 \text{ \AA}$  in Türkisblau und Entfernungen zwischen  $4$  und  $5 \text{ \AA}$  in Hellgrau eingefärbt. Unter **2** sind die jeweiligen Strukturen von **1** um  $180^\circ$  gedreht dargestellt. Dieser Schritt dient ebenfalls minimaler Anpassungen. **A:** Zu sehen ist die Struktur nach dem zweiten Docking. Die Triade ist gut verdeckt. **B:** Zu sehen ist die Struktur nach dem zweiten Design. Die Triade ist weiterhin vollständig verdeckt. **C:** Zu sehen sind die beiden überlagerten Strukturen. Es ist eine minimale Änderung der Orientierung von Albumin erkennbar.

## 5.8. Final

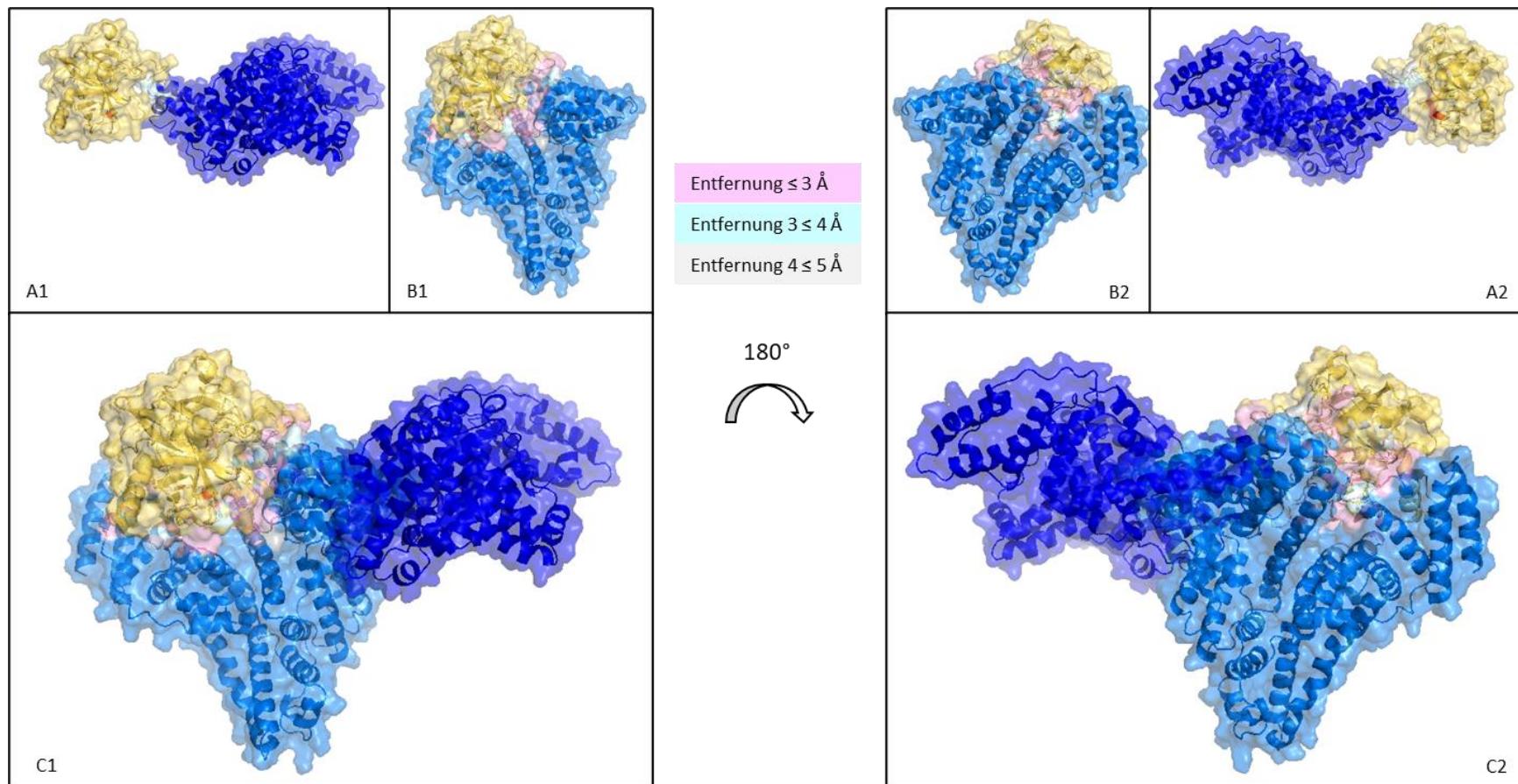


Abbildung 23: PyMol-Bilder der Ausgangsstruktur und die finale Struktur nach dem zweiten Design.

In Blau ist das Albumin 2, in Gelborange das Chymotrypsin. Die Triade des Chymotrypsins ist in Rot dargestellt. Außerdem sind die Entfernungen zwischen Chymotrypsin und Albumin in unterschiedlichen Farben dargestellt. Entfernungen von maximal  $3 \text{ \AA}$  sind in Pink, Entfernungen zwischen  $3$  und  $4 \text{ \AA}$  in Türkisblau und Entfernungen zwischen  $4$  und  $5 \text{ \AA}$  in Hellgrau eingefärbt. Unter **2** sind die jeweiligen Strukturen von **1** um  $180^\circ$  gedreht dargestellt. Dieser Schritt dient ebenfalls minimaler Anpassungen. **A:** Zu sehen ist die Ausgangsstruktur. Die Triade ist gut ersichtlich. **B:** Zu sehen ist die finale Struktur nach dem zweiten Design. Durch das Anschmiegen des Albumins in die Tasche ist die Triade verdeckt. **C:** Zu sehen sind die beiden überlagerten Strukturen. Das Albumin ist in seiner ursprünglichen Orientierung komplett verändert.

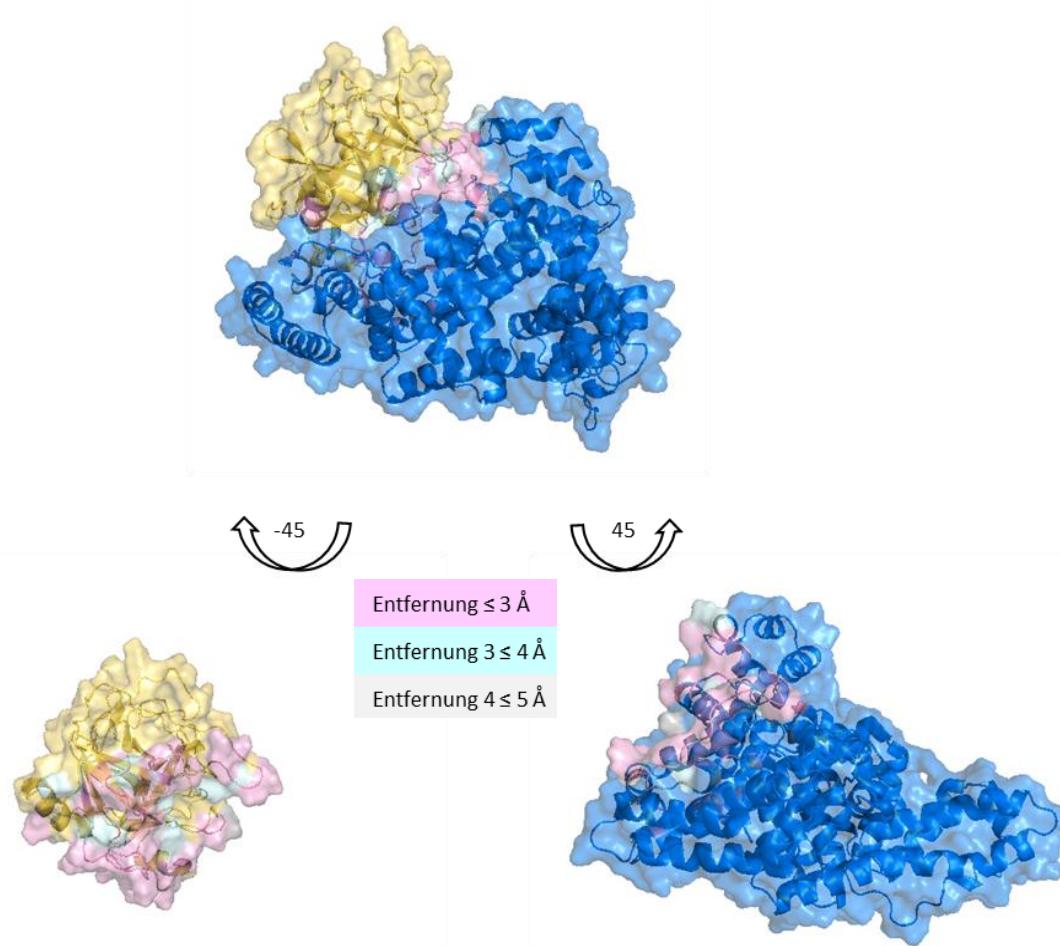


Abbildung 24: PyMol-Bilder der finalen Struktur.

In Blau ist das Albumin 2, in Gelborange das Chymotrypsin. Die Triade des Chymotrypsins ist in Rot dargestellt. Außerdem sind die Entferungen zwischen Chymotrypsin und Albumin in unterschiedlichen Farben dargestellt. Entfernungen von maximal 3 Å sind in Pink, Entfernungen zwischen 3 und 4 Å in Türkisblau und Entfernungen zwischen 4 und 5 Å in Hellgrau eingefärbt. Die Proteine werden voneinander gelöst und um 45° gedreht. So ist die jeweilige Bindungsseite zu erkennen.

## 6. Chymo 2.3

### 6.1. Originale Sequenz

Im Folgenden ist die originale Peptidsequenz von Albumin zu sehen. In Rot sind die auszutauschenden Aminosäuren markiert.

```
>6HSC_1|Chains A, B|SERUM ALBUMIN|Homo sapiens (9606)
001 DAHKSEVAHRFKDLGEENFKALVLIAFAQYLQQCPFEDHVKLNEVTEFA 050
051 KTCVADESAENCDKSLHTLFGDKLCTVATLRETYGEMADCCAKQEPERNE 100
101 CFLQHKDDNPNLPRLVRPEVDVMCTAFHDNEETFLKKYLYEIARRHPYFY 150
151 APPELLFFAKRYKAAFTECCQAADKAACLPKLDELRDEGKASSAKQRLKC 200
201 ASLQKFGERAFKAWAVARLSQRFPKAEFAEVSKLVTDLTKVHTECCHGDL 250
251 LECADDRADLAKYICENQDSISSKLKECCEKPLEKSHCIAEVENDMPA 300
301 DLPSLAADFVESKDVKNYAEAKDVFLGMFLYEYARRHPDYSVVLLRLA 350
351 KTYETLEKCCAAADPHECYAKVFDEFKPLVEEPQNLIKQNCELFQLGE 400
401 YKFQNALLVRYTKVPQVSTPTLVEVSRNLGKVGSKCKHPEAKRMPCAE 450
451 DYLSVVLNQLCVLHEKTPVSDRVTKCCTESLVNRRPCFSALEVDETYVPK 500
501 EFNAETFTFHADICTLSEKERQIKKQTALVELVKHKPKATKEQLKAVMDD 550
551 FAAFVEKCCKADDKETCFAEEGKKLVAASQAALGL 585
```

### 6.2. Mutierte Sequenz

Im Folgenden ist die mutierte Peptidsequenz von Chymo2.3 zu sehen. In Grün sind die ausgetauschten Aminosäuren markiert.

```
>Chymo2.3
001 DAHKSEVAHRFKDLGEENFKALVLIAFAQYLQQCPFEDHVKLNEVTEFA 050
051 KTCVADESAENCDKSLHTLFGDKLCTVATLRETYGKMADCCAKQEDRNL 100
101 CFLKHLNLYPNLPRLVRPEVDVMCTAFHDNEETFLKKYLYEIARRHPYFY 150
151 APPELLFFAKRYKAAFTECCQAADKAACLPKLDELRDEGKASSAKQLLKC 200
201 MSLQKFQKFFKAWAVARLSQRFPKAEFAEVSKLVTDLTKVHTECCLGDL 250
251 LECADDRADLAKYICENQDSISSKLKECCEKPLEKSHCIAEVENDMPA 300
301 DLPSLAADFVESKDVKNYAEAKDVFLGMFLYEYARRHPDYSVVLLRLA 350
351 YTYAETLEKCCAAADPHECYAKVFDEFKPLVEEPQNLIKQNCELFQLGE 400
401 YKFQNALLVRYTKVPMVSTPTLVEVSRNLGKVGSKCKHPEAKRMPCAE 450
451 DYLSVVLNQLCLLHLKTPYADKVCLLSLVNRRPCFSALEVDESYVPK 500
501 EFNAETFTFHADICTLSEKERQIKKQTALVELVKHKPKATKEQLKAVMDD 550
551 FAAFVEKCCKADDKETCFAEEGKKLVAASQAALGL 585
```

### 6.3. Eingefügte Mutationen

In Tabelle 6 sind die in Chymo2.3 eingefügten Mutationen dargestellt.

Tabelle 6: in Chymo2.3 eingefügte Mutationen.

86) E → K	208) E → Q	465) E → L
97) E → D	209) R → K	469) V → Y
100) E → L	210) A → F	470) S → A
104) Q → K	247) H → L	472) R → K
106) K → L	351) K → Y	474) T → L
107) D → N	354) E → A	475) K → V
108) D → L	355) T → E	478) T → L
109) N → Y	417) Q → M	479) E → L
197) R → L	462) V → L	496) T → S
201) A → M		

## 6.4. erstes Docking

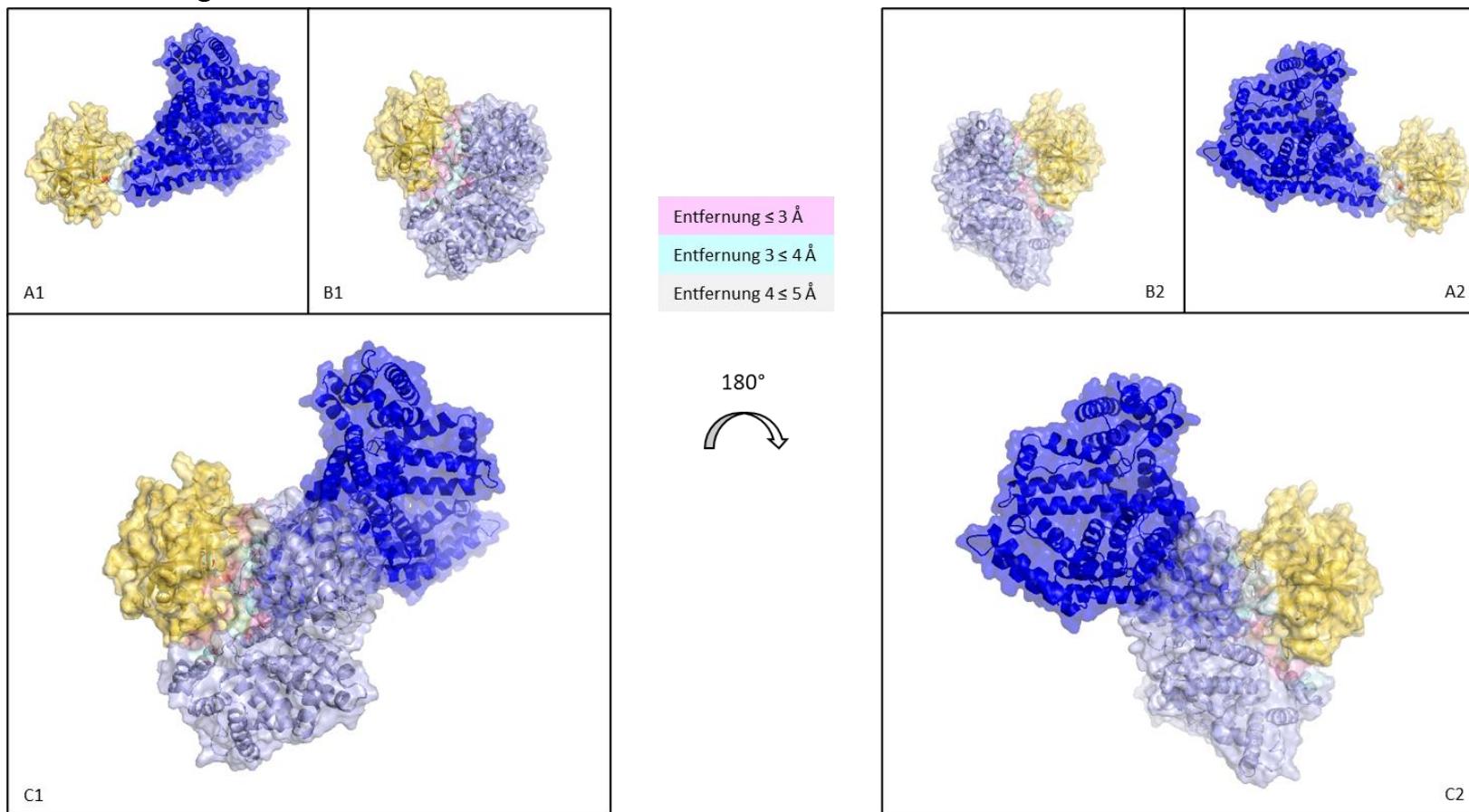


Abbildung 25: PyMol-Bilder der Anfangsstruktur und der Struktur nach dem ersten Docking.

In Blau ist das Albumin 2, in Gelborange das Chymotrypsin. Die Triade des Chymotrypsins ist in Rot dargestellt. Außerdem sind die Entferungen zwischen Chymotrypsin und Albumin in unterschiedlichen Farben dargestellt. Entfernungen von maximal 3 Å sind in Pink, Entfernungen zwischen 3 und 4 Å in Türkisblau und Entfernungen zwischen 4 und 5 Å in Hellgrau eingefärbt. Unter **2** sind die jeweiligen Strukturen von **1** um 180° gedreht dargestellt. **A:** Zu sehen ist die Ausgangsstruktur. Die Triade ist noch gut zu sehen. **B:** Zu sehen ist die Struktur nach dem ersten Docking. Das Albumin ist näher in die Tasche des Chymotrypsin gerückt und verdeckt teilweise die Triade. **C:** Zu sehen sind die beiden überlagerten Strukturen. Eine deutlich eingefügte Rotation im Albumin ist zu erkennen.

## 6.5. erstes Design

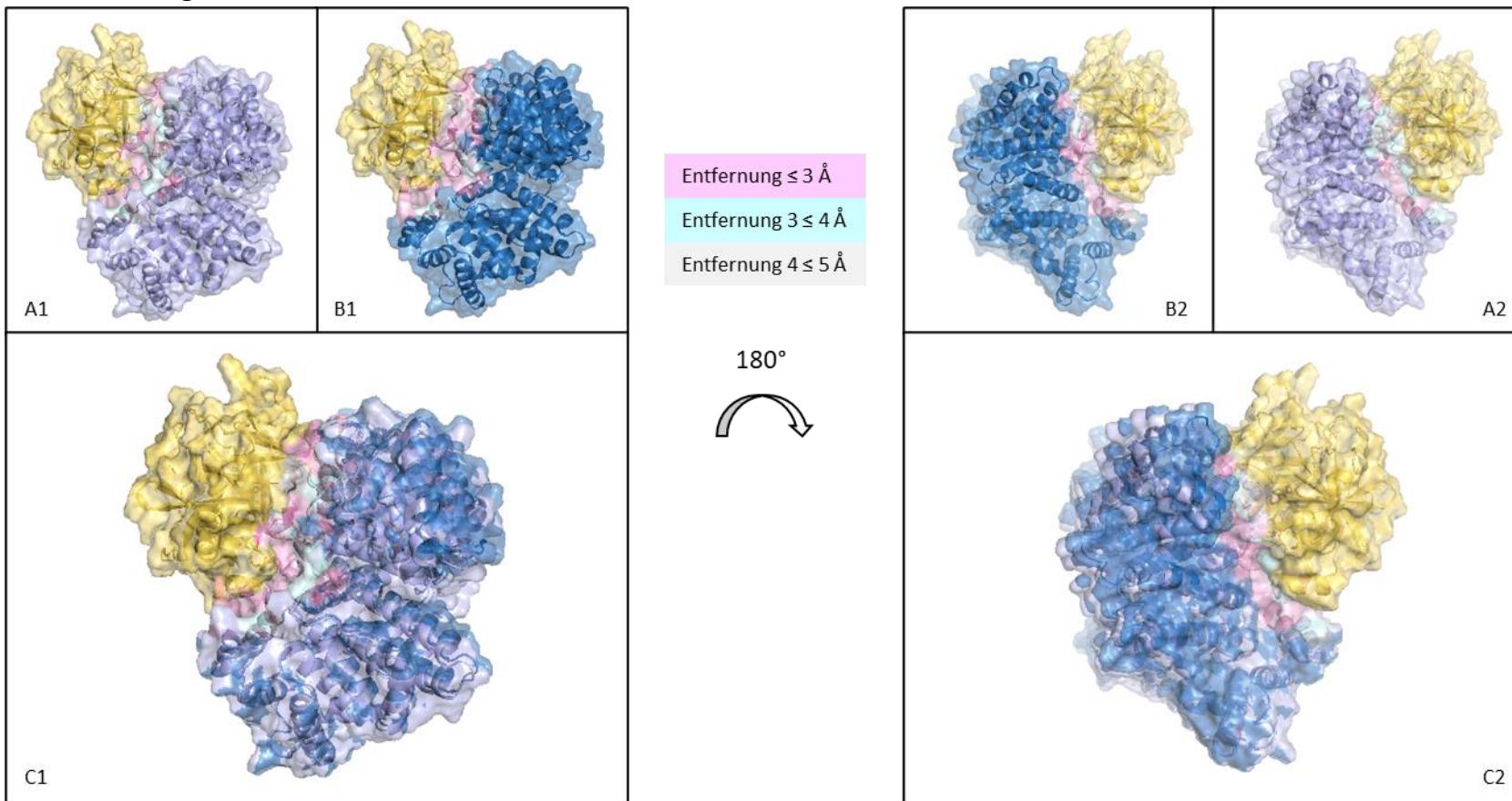


Abbildung 26: PyMol-Bilder der Struktur nach dem ersten Docking und nach dem ersten Design.

In Blau ist das Albumin 2, in Gelborange das Chymotrypsin. Die Triade des Chymotrypsins ist in Rot dargestellt. Außerdem sind die Entfernungen zwischen Chymotrypsin und Albumin in unterschiedlichen Farben dargestellt. Entfernungen von maximal  $3 \text{ \AA}$  sind in Pink, Entfernungen zwischen  $3$  und  $4 \text{ \AA}$  in Türkisblau und Entfernungen zwischen  $4$  und  $5 \text{ \AA}$  in Hellgrau eingefärbt. Unter **2** sind die jeweiligen Strukturen von **1** um  $180^\circ$  gedreht dargestellt. **A:** Zu sehen ist die Struktur nach dem ersten Docking. Die Triade ist teilweise verdeckt. **B:** Zu sehen ist die Struktur nach dem ersten Design. Das Albumin ist näher in die Tasche des Chymotrypsin gerückt und verdeckt die Triade vollständig. **C:** Zu sehen sind die beiden überlagerten Strukturen. Das Albumin ist etwas mehr in die Tasche des Chymotrypsins gerutscht.

## 6.6. zweites Docking

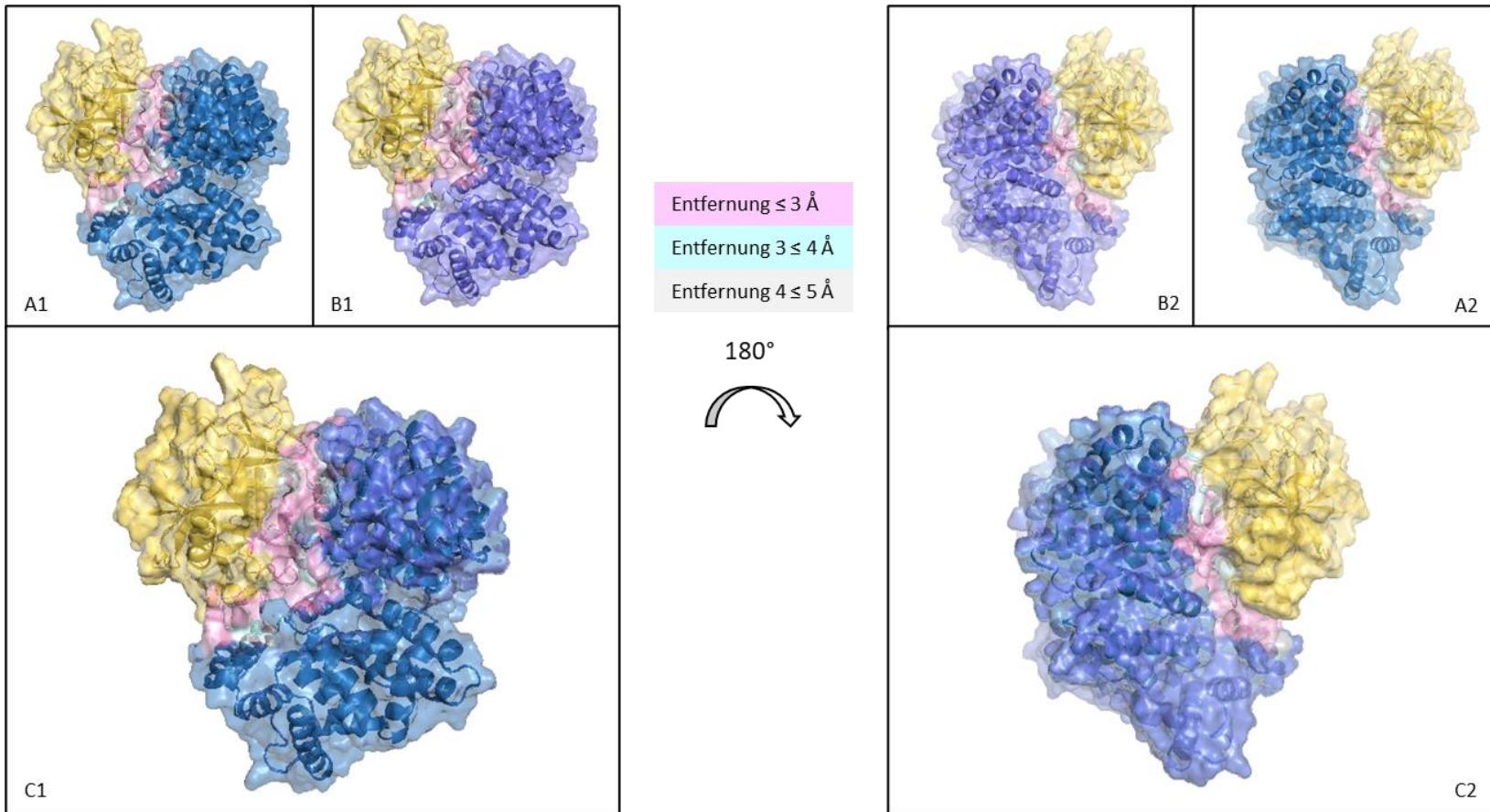


Abbildung 27: PyMol-Bilder der Struktur nach dem ersten Design und nach dem zweiten Docking.

In Blau ist das Albumin 2, in Gelborange das Chymotrypsin. Die Triade des Chymotrypsins ist in Rot dargestellt. Außerdem sind die Entfernungen zwischen Chymotrypsin und Albumin in unterschiedlichen Farben dargestellt. Entfernungen von maximal 3 Å sind in Pink, Entfernungen zwischen 3 und 4 Å in Türkisblau und Entfernungen zwischen 4 und 5 Å in Hellgrau eingefärbt. Unter **2** sind die jeweiligen Strukturen von **1** um 180° gedreht dargestellt. Dieser Schritt dient minimaler Anpassungen. **A:** Zu sehen ist die Struktur nach dem ersten Design. Die Triade ist gut verdeckt. **B:** Zu sehen ist die Struktur nach dem zweiten Docking. Die Triade ist weiterhin vollständig verdeckt. **C:** Zu sehen sind die beiden überlagerten Strukturen. Es ist eine minimale Änderung der Orientierung von Albumin erkennbar.

## 6.7. zweites Design

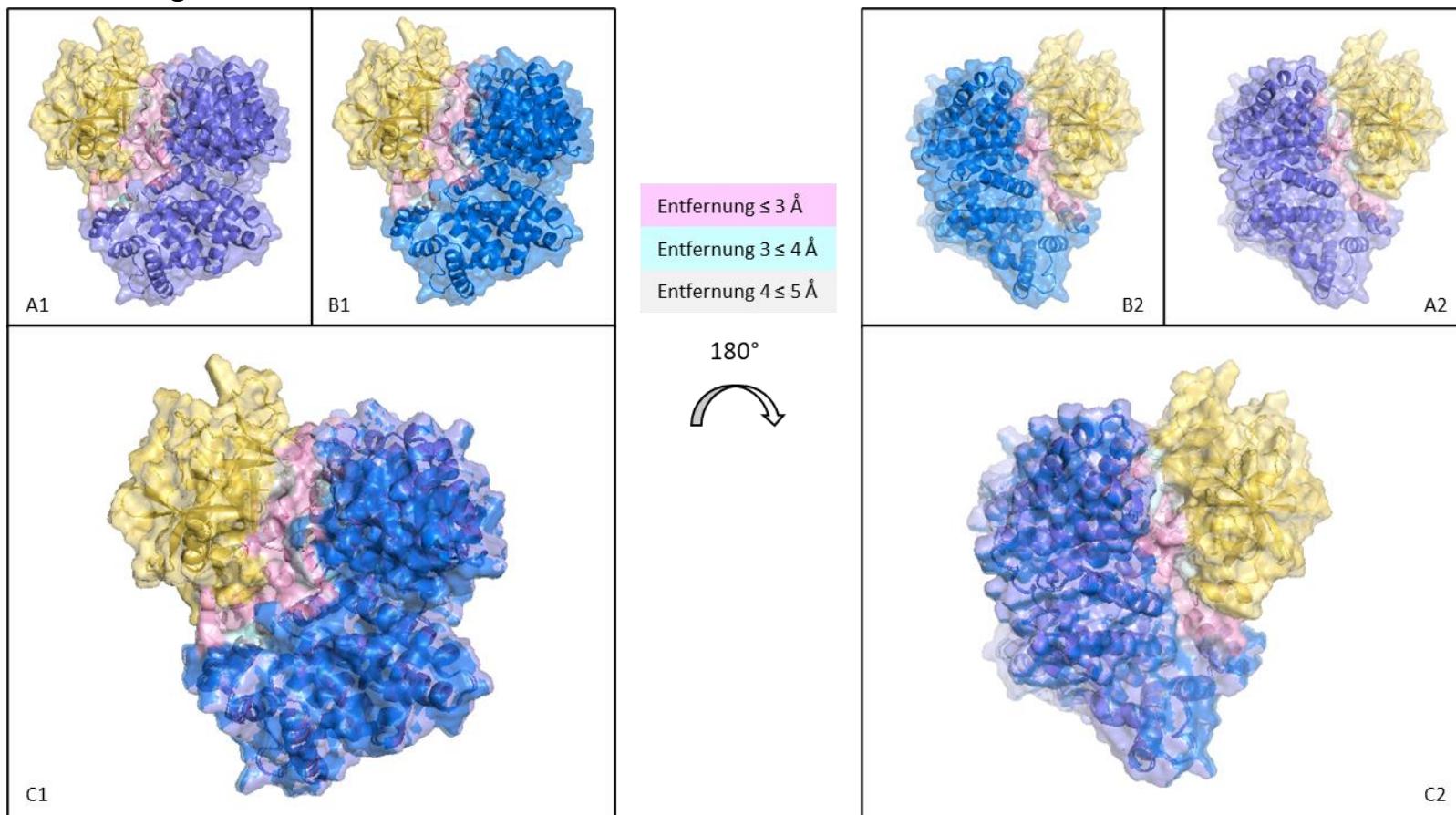


Abbildung 28: PyMol-Bilder der Struktur nach dem zweiten Docking und die finale Struktur nach dem zweiten Design.

In Blau ist das Albumin 2, in Gelborange das Chymotrypsin. Die Triade des Chymotrypsins ist in Rot dargestellt. Außerdem sind die Entfernungen zwischen Chymotrypsin und Albumin in unterschiedlichen Farben dargestellt. Entfernungen von maximal 3 Å sind in Pink, Entfernungen zwischen 3 und 4 Å in Türkisblau und Entfernungen zwischen 4 und 5 Å in Hellgrau eingefärbt. Unter 2 sind die jeweiligen Strukturen von 1 um 180° gedreht dargestellt. Dieser Schritt dient ebenfalls minimaler Anpassungen. **A:** Zu sehen ist die Struktur nach dem zweiten Docking. Die Triade ist gut verdeckt. **B:** Zu sehen ist die Struktur nach dem zweiten Design. Die Triade ist weiterhin vollständig verdeckt. **C:** Zu sehen sind die beiden überlagerten Strukturen. Es ist eine minimale Änderung der Orientierung von Albumin erkennbar.

## 6.8. Final

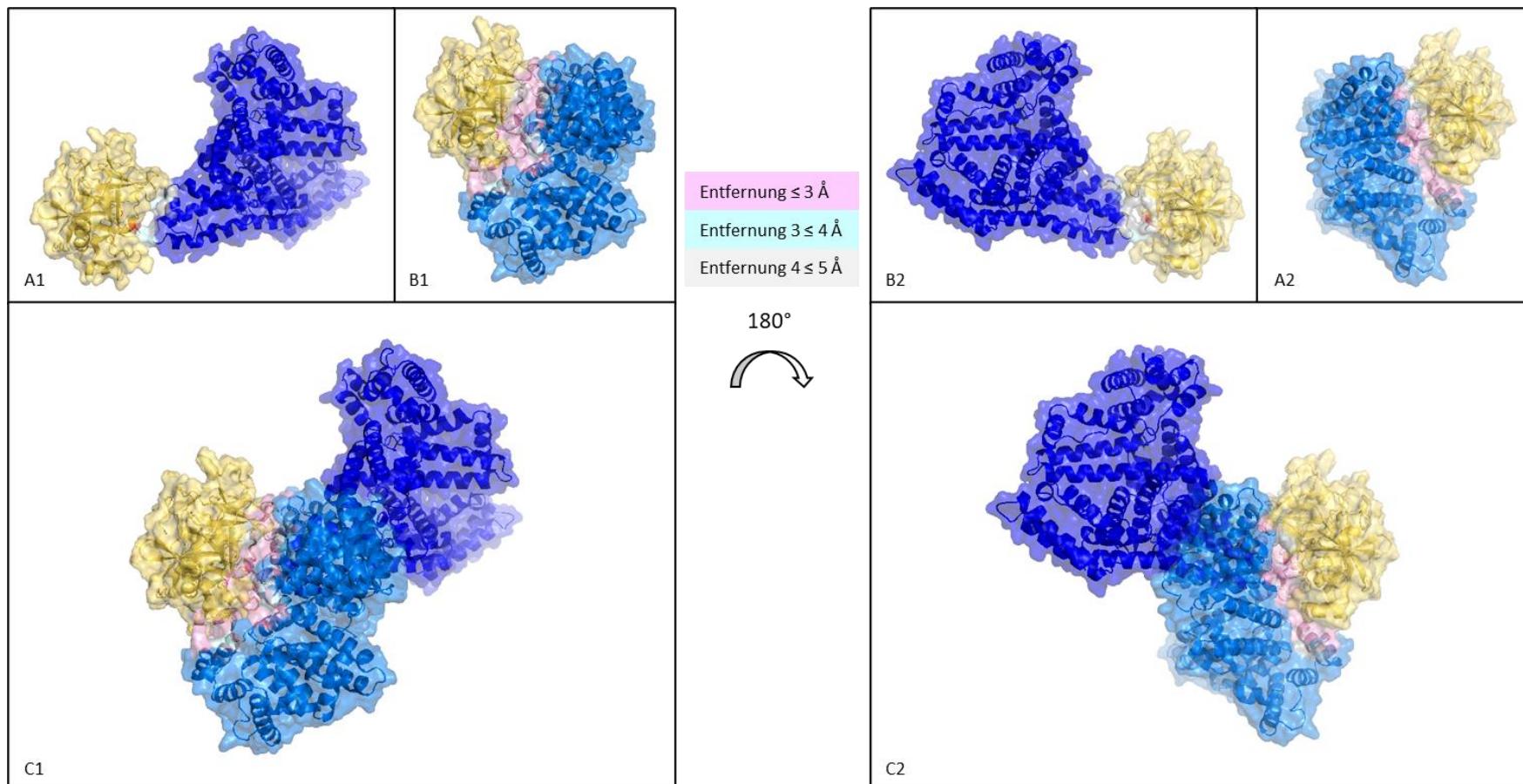


Abbildung 29: PyMol-Bilder der Ausgangsstruktur und die finale Struktur nach dem zweiten Design.

In Blau ist das Albumin 2, in Gelborange das Chymotrypsin. Die Triade des Chymotrypsins ist in Rot dargestellt. Außerdem sind die Entfernungen zwischen Chymotrypsin und Albumin in unterschiedlichen Farben dargestellt. Entfernungen von maximal 3 Å sind in Pink, Entfernungen zwischen 3 und 4 Å in Türkisblau und Entfernungen zwischen 4 und 5 Å in Hellgrau eingefärbt. Unter **2** sind die jeweiligen Strukturen von **1** um 180° gedreht dargestellt. Dieser Schritt dient ebenfalls minimaler Anpassungen. **A:** Zu sehen ist die Ausgangsstruktur. Die Triade ist gut ersichtlich. **B:** Zu sehen ist die finale Struktur nach dem zweiten Design. Durch das Anschmiegen des Albumins in die Tasche ist die Triade verdeckt. **C:** Zu sehen sind die beiden überlagerten Strukturen. Das Albumin ist hat sich in seiner ursprünglichen Orientierung komplett verändert.

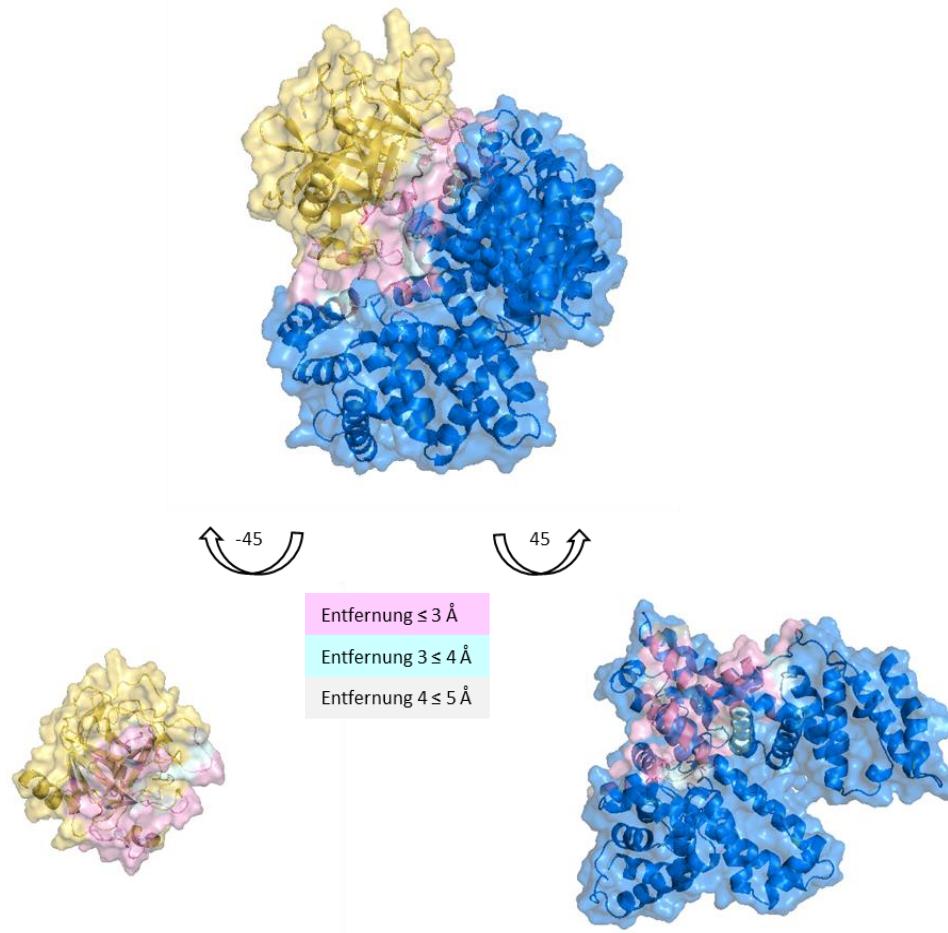


Abbildung 30: PyMol-Bilder der finalen Struktur.

In Blau ist das Albumin 2, in Gelborange das Chymotrypsin. Die Triade des Chymotrypsins ist in Rot dargestellt. Außerdem sind die Entferungen zwischen Chymotrypsin und Albumin in unterschiedlichen Farben dargestellt. Entfernungen von maximal 3 Å sind in Pink, Entfernungen zwischen 3 und 4 Å in Türkisblau und Entfernungen zwischen 4 und 5 Å in Hellgrau eingefärbt. Die Proteine werden voneinander gelöst und um 45° gedreht. So ist die jeweilige Bindungsseite zu erkennen.

## 7. FLS2\_1

### 7.1. Originale Sequenz

Im Folgenden sind die originalen Peptidsequenzen von FLS2 und BAK1 zu sehen. In Rot sind die auszutauschenden Aminosäuren markiert.

#### Wild Type Fasta Sequence of FLS2

```
>sp|Q9FL28|24-784
 24 KQSFEPEIEALKSFKNGISNDPLGVLSDWTDIIGSLRHCNWTGITCDSTGHVVSVSLEK      83
  84 LEGVLPSPAIANLTYLQVLDLTNSNSFTGKIPAEIGKLTELNLQLILYLYNYFSGSIPSGIWE 143
 144 KNIFYLDLRNNLLSGDVPEEICKTSSLVLIGFDYNNNLTGKIPCECLGDLVHLQMFVAAGN 203
 204 LTGSIPVSIGTLANLTDLDSGNQLTGKIPRGFGNLLNLQSLVTENLLEGDIPAEIGN 263
 264 SSLVQLELYDNQLTGKIPAEGLNLVQLQALRIYKNKLTSSIPSSLFRLTQLTHGLSEN 323
 324 LVGPISSEEIGFLESLEVLTLHSNNFTGEFPQSITNLRNLTVLTVGFFNNISGELPADLGL 383
 384 TNLRNLSAHDNLLTGPIPSSISNCTGLKLLDLSHNQMTGEIPRGFGRMNLTFSIGRNH 443
 444 TGEIPDDIFNCSNLETLSVADNNLTGTKLQKLRILQVSYNSLTGPIPEIGNL 503
 504 DLNILYLHSNGFTGRIPREMSNLTLLQGLRMYSNDLEGPIPEEMFDMKLLSVLDLSNNK 563
 564 SGQIPALFSKLESLYLSLQGNKFNGSIPASLKSLNNTFDISDNLLTGTIPGELLAS 623
 624 KNMQLYLNFSNNLLTGTIPKELGKLEMVQEIDLSNNLFSGSIPRSIQACKNVFTLDFSQ 683
 684 NLSGHIPDEVFQGMDMIISLNLSRNSFSGEIPQSFGNMTHLVSDLSSNNLTGEIPESL 743
 744 NLSTLKHLKLASNNLKGHVPEGVFKNINASDLMGNTDLCG                      784
```

#### Wild Type Fasta Sequence of BAK1

```
>sp|Q94F62|26-616
 26 NAEGDALSALKNSLADPNKVLQSWDATLVTPCTWFHTCNSDNSVTRVDLGNANLSQL 85
  86 MQLQLPQNQYLELYSNNITGTIPEQQLGNLTELVSLDLYLNNLSGPIPSTLGRIKLRF 145
 146 RLNNNSLSGEIPRSLTAVLTQVLDLSNNPLTGDIPVNGSFSLFTPISFANTKLTPLPA 205
 206 PPPPISPTPPSPAGSNRITGAIAGGVAAGAALLFAVPAIALAWRRKPQDHFFDVPAE 265
 266 DPEVHLGQLKRFSLRELQVASDNFSNKNILGRGGFGKVKYKGRLADGTLVAVKRLKEERT 325
 326 GGELQFQTEVEMISMAVHRNLLRLRGFCMTPTERLLVPYMANGVASCLRREPSQP 385
 386 DWPKRQRIALGSARGLAYLHDHCDPKIIHRDVKAANILDEEFEAVVGDFLAKLMDYK 445
 446 THVTTAVRGTIGHIAPYLSTGKSEKTDVFGYGVMLLELITGQRAFDLARLANDDVM 505
 506 LDWVKGLLKEKKLEALVDVDLQGNYKDEVEQLIQVALLCTQSSPMERPKMSEVVRMLE 565
 566 DGLAERWEWQKEEMFRQDFNYPTHHPAVSGWIGDSTQIENEYPSGPR 616
```

## 7.2. Mutierte Sequenz

Im Folgenden sind die mutierten Peptidsequenzen von FLS2\_1 zu sehen. In Grün sind die ausgetauschten Aminosäuren markiert.

>FLS2\_1, Chain\_A FLS2, 24-784  
24 KQSFEPEIEALKSFKNGISNDPLGVLSDW<sub>T</sub>IIGSLRHCNWTG<sub>I</sub>TCDSTGHVVSV<sub>S</sub>L<sub>E</sub>K 83  
84 LEGV<sub>L</sub>SPAIA<sub>N</sub>LTYLQVLDLYSNSFTGKIPAEIGKLTELNQLV<sub>L</sub>LLNYFSGSIPSGIWE 143  
144 KNIFYLELANNLLSGDVPEEICKTSSLV<sub>F</sub>ILFDYNNNLTGK<sub>I</sub>P<sub>E</sub>CLGDLVHLQ<sub>I</sub>FQ<sub>A</sub>AGN 203  
204 LTGSIPVSIGTLANLK<sub>F</sub>LDLSGNQLTGKIPRDFGNLLNL<sub>I</sub>F<sub>LLL</sub>FENLLEGDI<sub>P</sub>A<sub>E</sub>IGN 263  
264 SSLVFLVLYDNQLTGKIPAE<sub>L</sub>GNLVQLK<sub>F</sub>LLIFRNKL<sub>T</sub>SSIP<sub>S</sub>SSLFR<sub>L</sub>TQ<sub>L</sub>TY<sub>L</sub>V<sub>S</sub>NN 323  
324 LVGP<sub>I</sub>SEEIGFLESLEV<sub>L</sub>VLM<sub>S</sub>NNFTGEFPQSITNLRNLT<sub>I</sub>L<sub>V</sub>VQ<sub>N</sub>NNISGELPADLGL 383  
384 TNLR<sub>I</sub>LIA<sub>E</sub>NLLTGP<sub>I</sub>PIPSSISNCTGLK<sub>I</sub>LVLADNQMTGEI<sub>P</sub>RGFGRMNLT<sub>V</sub><sub>I</sub>IARNH 443  
444 TGEIPDDIFNCSNLE<sub>V</sub>LIVADNNLTGT<sub>L</sub>KPLIGKLQKLR<sub>V</sub>LIVSYNSLTG<sub>P</sub>IPREIGNL 503  
504 DLNA<sub>Y</sub>LHNSNGFTG<sub>R</sub>IPREMSNLTLLQGLRMYSNDLEGPIPEEMFDMKLLSVLDLSNNK 563  
564 SGQ<sub>I</sub>PALFSKLES<sub>L</sub>TYLSLQGNKFNGSIPASLKSLSLLNTFDISDNLLTGT<sub>I</sub>P<sub>G</sub>ELLAS 623  
624 KNMQ<sub>L</sub>YLNFSNNLLTGT<sub>I</sub>P<sub>K</sub>ELGKLEMVQEIDLSNNLFSGSIPRSI<sub>L</sub>QACKNVFTLDFSQ 683  
684 NLSGHIPDEVFQGMDMIISLNLSRNSFSGEIPQSFGNMTHLVSDLSSNNLTGEIPESL 743  
744 NLSTLKHLKLASNNLKGHVPEGVFKNINASDLMGNTDLCG 784

>FLS2\_1, Chain\_B (BAK1), 26-616  
26 NAEGDALSA<sub>L</sub>KN<sub>S</sub>LADPNKV<sub>L</sub>QSW<sub>I</sub>ATLVT<sub>P</sub>CTWFHVT<sub>C</sub>NSD<sub>N</sub>S<sub>V</sub>TRVDLG<sub>N</sub>AN<sub>L</sub>SGQL 85  
86 MQLGQLPNLQY<sub>Y</sub>LEY<sub>L</sub>YSNNITGT<sub>I</sub>PEQLGNLTEL<sub>V</sub>SL<sub>D</sub>LY<sub>L</sub>NNL<sub>S</sub>GPI<sub>P</sub>STL<sub>G</sub>R<sub>L</sub>KKLRF 145  
146 RLNNNSLSGEI<sub>P</sub>RS<sub>I</sub>TAV<sub>L</sub>TLQVLDLSNNPLTG<sub>D</sub>IPVN<sub>G</sub>S<sub>F</sub>SLFTP<sub>I</sub>S<sub>F</sub>ANTKL<sub>T</sub>PLPA 205  
206 PPPPISPTPPSPAGSNR<sub>I</sub>TGAIAGGVAAGAALLFAVPA<sub>I</sub>ALAWWRRKKPQDHFFDVPAE 265  
266 DPEVHLGQLKRF<sub>S</sub>LRELQVASDNFSNK<sub>N</sub>ILGRGGFGK<sub>V</sub>K<sub>G</sub>R<sub>L</sub>ADGT<sub>L</sub>V<sub>A</sub>V<sub>K</sub>R<sub>L</sub>KEERT 325  
326 GGELQFQTEVEMI<sub>S</sub>MAVR<sub>H</sub>R<sub>N</sub>LLRLRGFCMTP<sub>E</sub>RLV<sub>V</sub>P<sub>M</sub>ANGSVASCLR<sub>R</sub>P<sub>E</sub>SQ<sub>P</sub>P 385  
386 DWPKRQRIALGSARGLAYLHDHCDPK<sub>I</sub>IHRDVKAAN<sub>I</sub>LDEEF<sub>E</sub>AVVGDFGLAKLMDYK 445  
446 THVTTAVRG<sub>T</sub>IIGHIAPEYLSTGKSSEKT<sub>D</sub>VFGYGVML<sub>L</sub>ELITGQRAFD<sub>L</sub>ARLANDDDVM 505  
506 LDWVK<sub>G</sub>LLKEKK<sub>L</sub>EA<sub>L</sub>V<sub>D</sub>V<sub>D</sub>LQ<sub>G</sub>NYK<sub>D</sub>EVEQLI<sub>Q</sub>V<sub>A</sub>LLCTQ<sub>S</sub>SPMER<sub>P</sub>K<sub>M</sub>EV<sub>V</sub>RM<sub>L</sub>E 565  
566 DGLAERWEWQKEEMFRQDFNYP<sub>T</sub>H<sub>H</sub>PAVSGWI<sub>I</sub>GDSTS<sub>Q</sub>IENEYPSGPR 616

### 7.3. Eingefügte Mutationen

In Tabelle 7 und Tabelle 8 sind die in FLS2\_1 eingefügten Mutationen dargestellt.

Tabelle 7: In FLS2\_1 eingefügte Mutationen in den FLS2-Rezeptor.

<b>Positions chain A (FLS2)</b>	<b>From</b>	<b>To</b>	<b>Positions chain A (FLS2)</b>	<b>From</b>	<b>To</b>	<b>Positions chain A (FLS2)</b>	<b>From</b>	<b>To</b>
127	T	Y	293	E	V	390	S	I
126	I	V	291	Q	K	392	H	A
128	Y	L	292	A	F	393	D	E
150	D	E	294	R	L	412	L	I
152	R	A	296	Y	F	414	D	V
172	L	F	297	K	R	416	S	A
174	G	L	316	H	Y	417	H	D
196	M	L	318	G	V	435	F	V
198	V	Q	321	E	N	437	S	I
219	T	K	342	T	V	439	G	A
220	D	F	344	H	M	459	T	V
243	Q	I	364	V	I	461	S	I
244	S	F	366	T	V	483	I	V
246	V	L	368	G	Q	485	Q	I
248	T	F	369	F	N	507	I	A
268	Q	F	388	N	I			

Tabelle 8: In FLS2\_1 eingefügte Mutationen des BAK1.

<b>Poitions Chain B (BAK1)</b>	<b>From</b>	<b>To</b>
211	D	I

## 8. FLS2\_2

### 8.1. Originale Sequenz

Im Folgenden ist die originale Peptidsequenz von FLS2 zu sehen. In Rot sind die auszutauschenden Aminosäuren markiert.

>sp|Q9FL28|24-784

24 KQSFEPEIEALKSFKNGISNDPLGVLSDW	TIIIGSLRHCNWTG	ITCDSTGHVVSVS	LLEKQ	83								
84 LEGVLSPAIA	NLTYLQVLDL	T	SNSFTGKIPAEIGKLTELNL	Q	LYFSGSIPSGI	WEL	143					
144 KNIFYL	DLRNLLSGDV	PEEICKTSSLV	L	I	GFDYNNLTGKIP	ECLGDLVHLQ	M	FVAAGNH	203			
204 LTGSIPV	SIGTLANL	T	DLDLSGNQLTGKIP	RDFGNLLNL	Q	SLVLTENLLEGDI	P	AEGNC	263			
264 SSLVQ	LELYDNQ	LTGKIP	AELGNLVQL	QALRI	Y	KNKLTSSIPSSL	FRLTQL	THLGL	SENH	323		
324 LVGP	ISEEIGFLESLE	V	LTLHSNNFTGEFP	Q	POSITNLRNL	T	TVGFNNISGELP	ADLG	LL	383		
384 TNLRN	LSAHDNLL	T	GPIP	S	I	NCNTGLK	L	DLSHNQMTGE	I	PRGFGRMNLT	FISIGRNHF	443
444 TGEIP	PDDIFNC	SNLET	LSVADNNLTG	T	KPLIGKLQ	KLR	I	QVSYNSLTG	P	REIGNLK	503	
504 DLN	ILYLSNGFTG	RIPREMSNL	TLLQGLRMYS	SNDLEG	P	PIPEEMF	DMKLLSV	DL	SDLSNNKF	563		
564 SGQIP	ALFSKLES	LTYL	SLQGNKFNGSIP	PASLKS	L	LLNTFD	ISDNLL	TGTIP	GEELLASL	623		
624 KNMQ	LYLNFSNN	LLTG	TIPKELGKLEMVQE	IDLSNNLF	S	GSIPRSLQACKNV	FTLDFSQ	N	NLTGEI	PESLA	683	
684 NLSGHI	IPDEVFGMD	MIISLN	LSRNSFSGE	IPQSF	G	NMTHLVS	LDLSSNN	LTGEI	PESLA	743		
744 NLSTLKHL	KLASNN	LKGHV	PESGVFK	NINASDLM	G	NTDLCG					784	

### 8.2. Mutierte Sequenz

Im Folgenden ist die mutierte Peptidsequenz von FLS2\_2 zu sehen. In Grün sind die ausgetauschten Aminosäuren markiert.

>FLS2\_2, Chain\_A FLS2, 24-784

24 KQSFEPEIEALKSFKNGISNDPLGVLSDW	TIIIGSLRHCNWTG	ITCDSTGHVVSVS	LLEKQ	83													
84 LEGVLSPAIA	NLTYLQVLDL	T	SNSFTGKIPAEIGKLTELNL	AL	LYFSGSIPSGI	WEL	143										
144 KNIFYL	LLANNLLSGDV	PEEICKTSSLV	F	INF	DYNNLTGKIP	ECLGDLVHLQ	L	FVAAGNH	203								
204 LTGSIPV	SIGTLANL	K	NLNSGNQLTGKIP	RDFGNLLNL	L	V	LILAENLLEGDI	P	AEGNC	263							
264 SSLV	ILVLYANQ	LTGKIP	AELGNLVQL	L	LI	I	FKNKLTSSIPSSL	FRLTQL	L	LILAENH	323						
324 LVGP	ISEEIGFLESLE	I	L	ILMHNNFTGEFP	Q	S	POSITNRLN	T	I	IVMMNNISGELP	ADLG	LL	383				
384 TNLR	I	IA	DNL	TGPIP	S	I	NCNTGLK	I	L	ADNQMTGE	I	PRGFGRMNLT	V	I	I	KRNHF	443
444 TGEIP	PDDIFNC	SNLET	I	LVADNNLTG	T	KPLIGKLQ	KLR	V	L	NVSYNSLTG	P	REIGNLK	503				
504 DLN	Q	LYL	SNGFTG	RIPREMSNL	T	LLQGLRMYS	SNDLEG	P	PIPEEMF	DMKLLSV	DL	SDLSNNKF	563				
564 SGQIP	ALFSKLES	LTYL	SLQGNKFNGSIP	PASLKS	L	LLNTFD	ISDNLL	TGTIP	GEELLASL	623							
624 KNMQ	LYLNFSNN	LLTG	TIPKELGKLEMVQE	IDLSNNLF	S	GSIPRSLQACKNV	FTLDFSQ	N	NLTGEI	PESLA	683						
684 NLSGHI	IPDEVFGMD	MIISLN	LSRNSFSGE	IPQSF	G	NMTHLVS	LDLSSNN	LTGEI	PESLA	743							
744 NLSTLKHL	KLASNN	LKGHV	PESGVFK	NINASDLM	G	NTDLCG					784						

### 8.3. Eingefügte Mutationen

In Tabelle 9 sind die in FLS2\_2 eingefügten Mutationen dargestellt.

Tabelle 9: In FLS2\_2 eingefügten Mutationen.

Positions chain A (FLS2)	From	To	Positions chain A (FLS2)	From	To	Positions chain A (FLS2)	From	To
104	T	Y	270	E	V	369	F	M
128	Y	A	273	D	A	388	N	I
150	D	L	291	Q	L	390	S	I
152	R	A	292	A	I	392	H	A
172	L	F	294	R	I	412	L	I
174	G	N	296	Y	F	414	D	I
196	M	L	315	T	L	416	S	A
219	T	K	316	H	I	417	H	D
220	D	N	318	G	I	435	F	V
222	D	N	320	S	A	437	S	I
243	Q	L	340	V	I	439	G	K
244	S	V	342	T	I	459	T	I
245	L	L	344	H	M	461	S	I
246	V	I	345	S	H	483	I	V
247	L	L	364	V	I	485	Q	N
248	T	A	366	T	I	507	I	Q
268	Q	I	368	G	M			

#### 8.4. erstes Docking

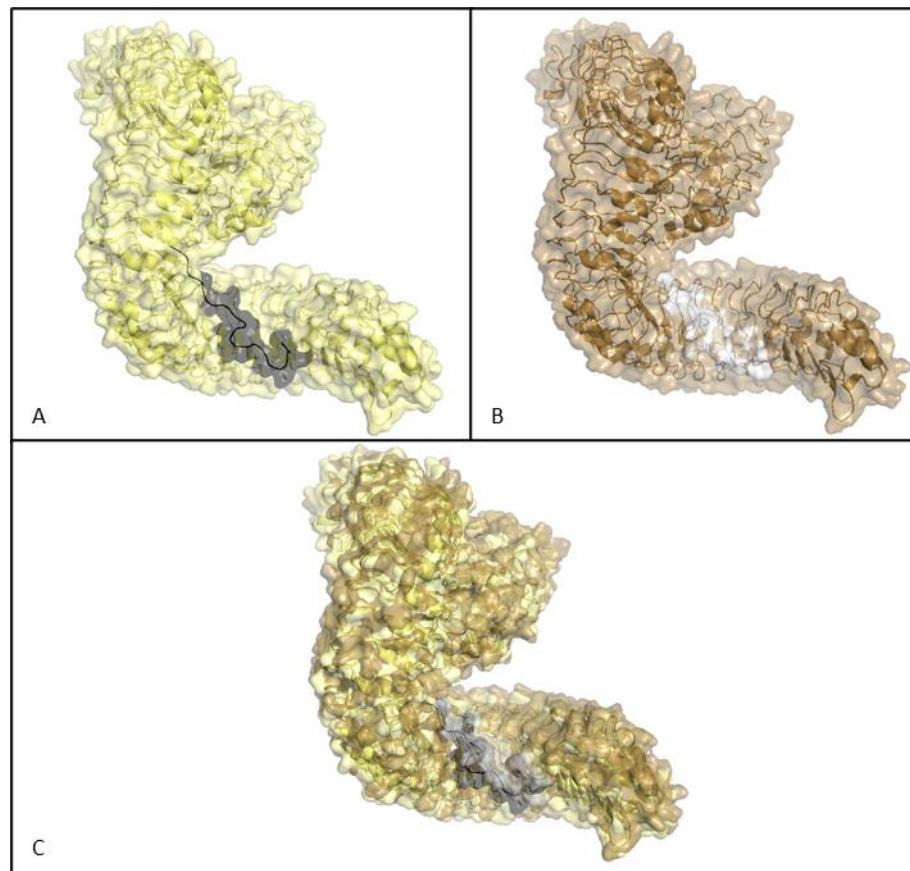


Abbildung 31: FLS2 mit BAK1 und dem eingesetzten Spike-Peptid 816 nach dem ersten Docking.

**A:** Zu sehen ist die Ausgangsstruktur von BAK1 mit FLS2 in Hellgelb mit dem eingesetzten 22 Aminosäuren langen Spike-Peptid 816 in grau. **B:** Zu sehen ist in Braun das FLS2 mit dem BAK1 und dem Peptid nach dem ersten Docking. **C:** Zu sehen sind die aus **A** und **B** überlagerten Strukturen. Es ist eine leichte Drehung im oberen Teil von FLS2 (N-Terminus) erkennbar.

## 8.5. erstes Design

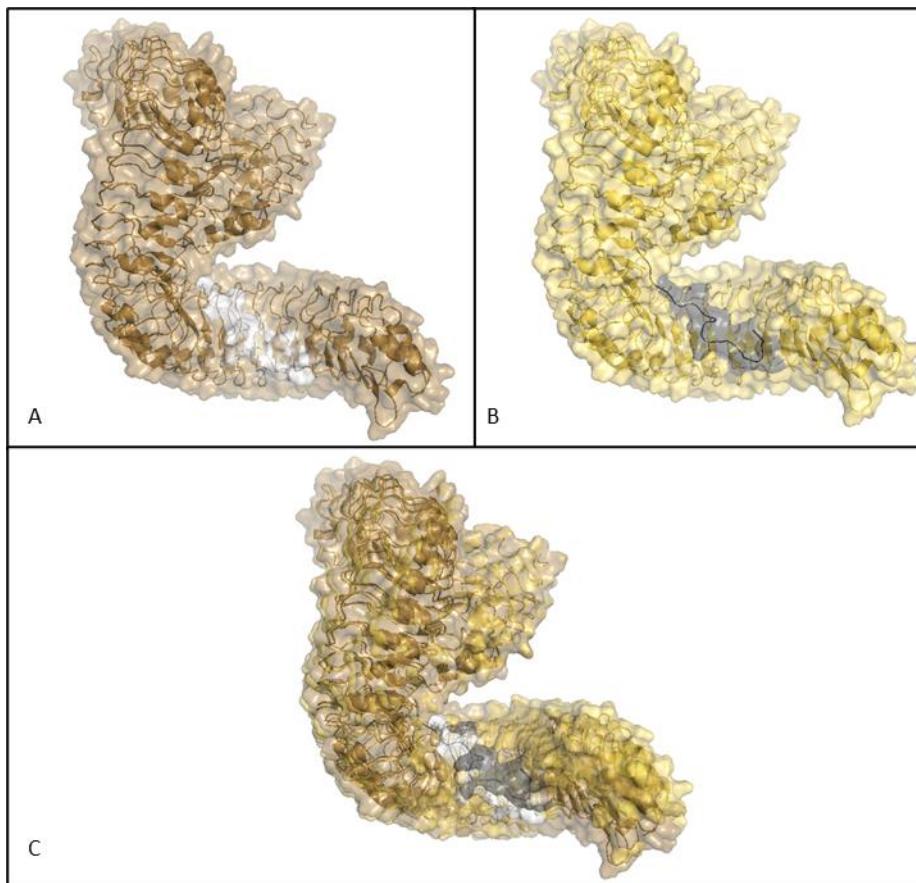


Abbildung 32: FLS2 mit BAK1 und dem eingesetzten Spike-Peptid 816 nach dem ersten Design.

**A:** Zu sehen ist die Struktur nach dem ersten Docking von BAK1 mit FLS2 in Braun mit dem eingesetzten 22 Aminosäuren langen Spike-Peptid 816 in hellgrau. **B:** Zu sehen ist in Gelb das FLS2 mit dem BAK1 und dem Peptid nach dem ersten Design. **C:** Zu sehen sind die aus **A** und **B** überlagerten Strukturen. Es ist eine leichte Drehung im unteren Teil von FLS2 (C-Terminus) erkennbar. Außerdem liegt das Peptid nun etwas angeschmiegter am FLS2 als nach dem ersten Docking.

## 8.6. zweites Docking

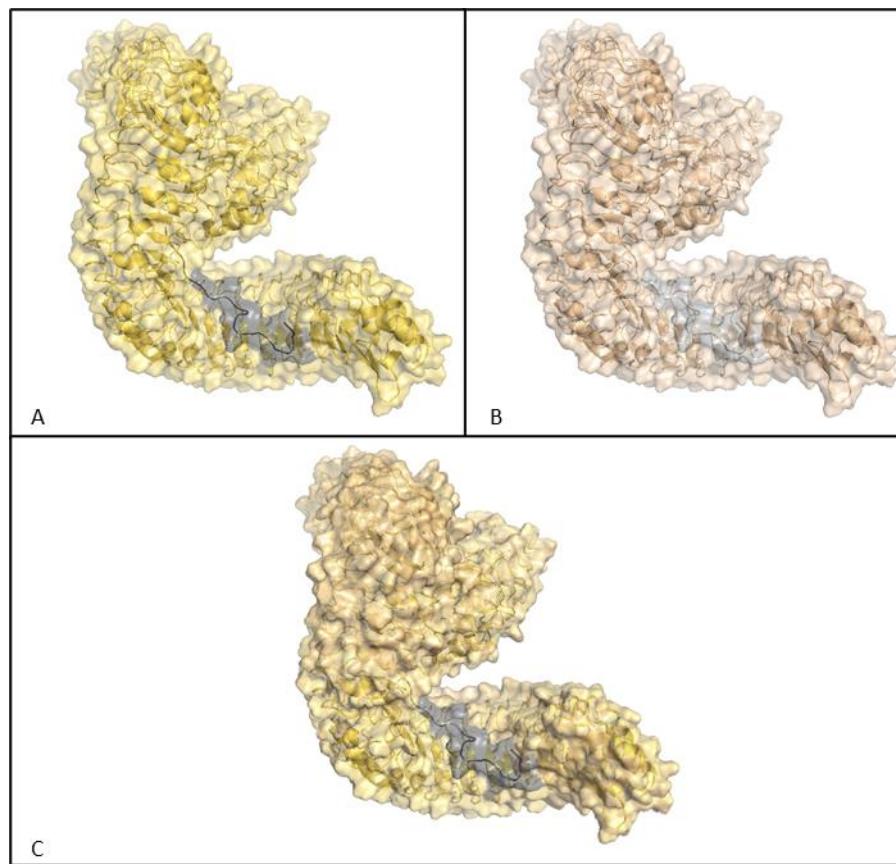


Abbildung 33: FLS2 mit BAK1 und dem eingesetzten Spike-Peptid 816 nach dem zweiten Docking.

**A:** Zu sehen ist die Struktur nach dem ersten Design von BAK1 mit FLS2 in Gelb mit dem eingesetzten 22 Aminosäuren langen Spike-Peptid 816 in Grau. **B:** Zu sehen ist in Hellbraun das FLS2 mit dem BAK1 und dem Peptid nach dem zweiten Docking. **C:** Zu sehen sind die aus **A** und **B** überlagerten Strukturen. Zwischen den beiden Schritten hat sich nicht viel getan.

## 8.7. zweites Design

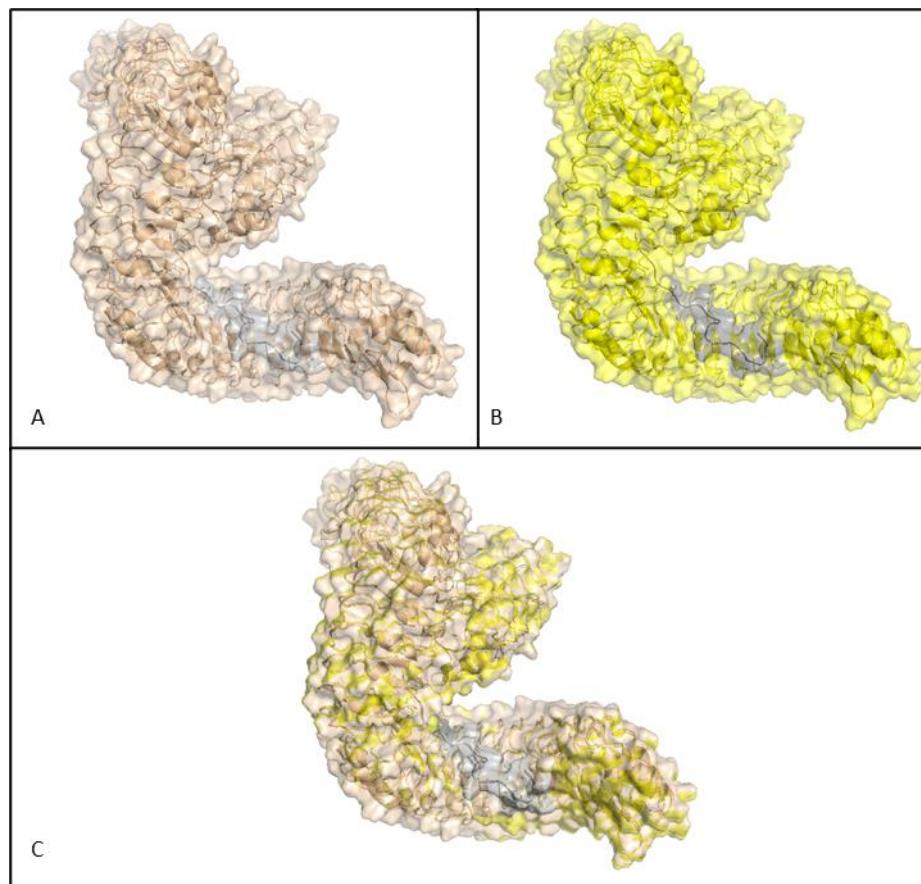


Abbildung 34: FLS2 mit BAK1 und dem eingesetzten Spike-Peptid 816 nach dem zweiten Design.

**A:** Zu sehen ist die Struktur nach dem zweiten Docking von BAK1 mit FLS2 in Hellbraun mit dem eingesetzten 22 Aminosäuren langen Spike-Peptid 816 in Grau. **B:** Zu sehen ist in Gelb das FLS2 mit dem BAK1 und dem Peptid nach dem zweiten Design. **C:** Zu sehen sind die aus **A** und **B** überlagerten Strukturen.

## 8.8. Final

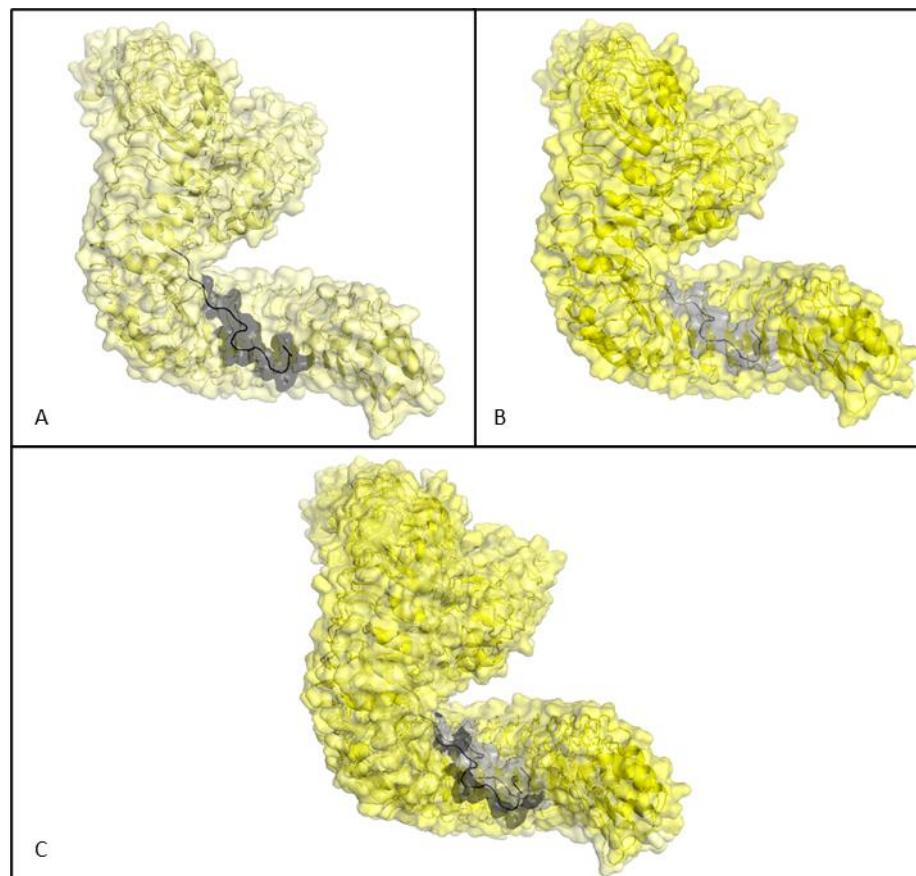


Abbildung 35: Vergleich der Ausgangs- mit der finalen Struktur von FLS2 mit BAK1 und dem eingesetzten Spike-Peptid 816.

**A:** Zu sehen ist die Ausgangsstruktur von BAK1 mit FLS2 in Hellgelb mit dem eingesetzten 22 Aminosäuren langen Spike-Peptid 816 in Dunkelgrau. **B:** Zu sehen ist in Gelb das FLS2 mit dem BAK1 und dem Peptid nach dem zweiten Design. **C:** Zu sehen sind die aus **A** und **B** überlagerten Strukturen. Zwischen den beiden Strukturen hat sich sowohl der FLS2-Rezeptor als auch das Peptid deutlich gedreht.

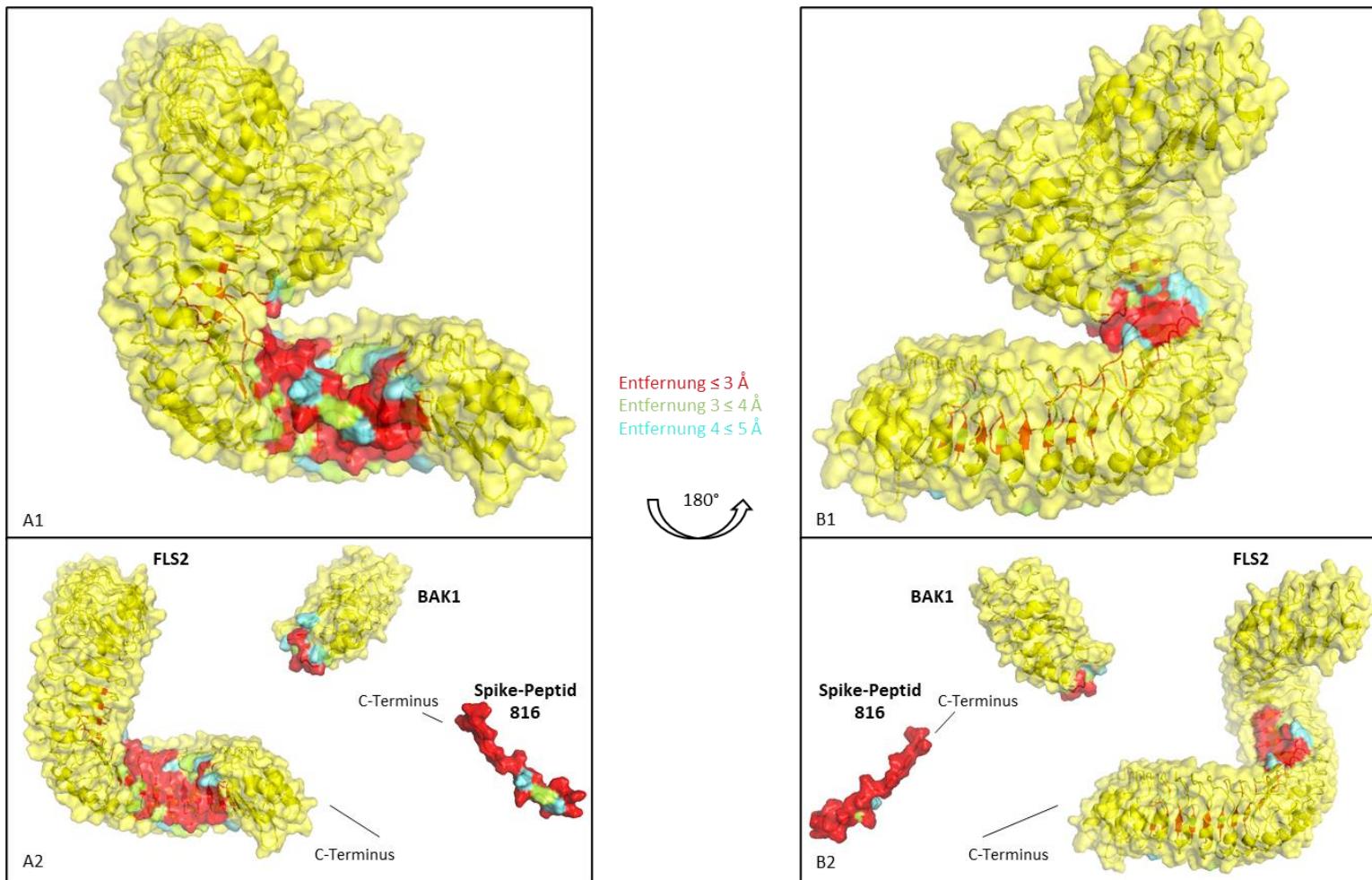


Abbildung 36: Darstellung der finalen Struktur mit der jeweiligen Bindefläche.

In Rot sind die Entferungen zwischen dem Peptid und BAK1 bzw. FLS2, die kleiner als  $3 \text{ \AA}$  betragen eingefärbt. In Grün sind die Entferungen zwischen Peptid und BAK1 bzw. FLS2, die zwischen  $3$  und  $4 \text{ \AA}$  betragen. In Blau sind die Entferungen zwischen Peptid und BAK1 bzw. FLS2, die zwischen  $4$  bis  $5 \text{ \AA}$  liegen. **A1:** Zu sehen ist die finale Struktur mit ihren eingefärbten Abständen. **A2:** Zu sehen sind aufgetrennten Proteine und das Spike-Peptid 816. Die Bereiche sind je nach ihrer Entfernung zueinander angefärbt. **B:** die um  $180^\circ$  gedrehten Strukturen von **A**.

## 9. FLS2\_3

### 9.1. Originale Sequenz

Im Folgenden ist die originale Peptidsequenz von FLS2 zu sehen. In Rot sind die auszutauschenden Aminosäuren markiert.

>sp|Q9FL28|24-784

24	KQSFEPEIEALKSFKNGISNDPLGVLSDW	TIIIGSLRHCNWTG	ITCDSTGHVVSVS	VSLLEKQ	83								
84	LEGVLSPA	IANLTYLQVLDLTSNSFTGKIPAEIGKLTELNL	Q	LYLNYFSGSIPSGIWEL	143								
144	KNIFY	DLRN	NLLSGDV	PEEICKTSSLV	LIGFDYNNLTGKIP	ECLGDLVHLQMF	VAA	GNH	203				
204	LTGS	IPVS	I	GT	LANLTD	LDLSGNQLTGKIP	PRDFGNLLNL	QSLV	TENLE	GDI	PAEIGNC	263	
264	SSLV	Q	LEYDNQ	LTGKIP	AELGNLVQL	QALRI	YKNKLTSS	IPSSL	FRLTQL	TH	GLSENH	323	
324	LVGP	I	SEEIGFLES	LEV	TLHSNNFTGEFP	Q	SITNLRNLT	TVGF	NNISGEL	PADLG	LL	383	
384	TNLRN	L	SAHDNLLT	GPIPSS	ISNCTGLK	LLDLSHNQMTGEI	PRGFGRMNLT	F	SIGRNHF	443			
444	TGEI	PDDIFNC	SNLET	LSVADNNLT	GTLKPLIGKLQ	Q	KLRLIL	QVSYNSLTG	PIP	REIGNL	K	503	
504	DLN	I	LYLHSNG	FTGRI	PREMSNL	LLQGLRMYS	NDLEG	PIPEEM	FDMK	LLSV	DLSNNKF	563	
564	SGQI	PALFSK	LES	TYL	SLQGNKFNGS	IPASLKS	LSLLNTFD	ISDNLLT	GTL	IPGELL	ASL	623	
624	KNM	Q	LYLNFS	NNLLT	G	TIPKELG	KLEMVQEID	LSNNLFSGS	IPRS	LQACKNV	FTLDFSQ	N	683
684	NLSGHI	P	DEV	FQGMD	MIISLN	LSRNS	FSGEIP	QSFGNM	THL	VSDL	SSNNLT	GEIPESLA	743
744	NLSTLKHL	KLASNN	LKGHV	PESGVFK	NINAS	DLMG	NTDLC					784	

### 9.2. Mutierte Sequenz

Im Folgenden ist die mutierte Peptidsequenz von FLS2\_3 zu sehen. In Grün sind die ausgetauschten Aminosäuren markiert.

>FLS2\_3 Chain\_A FLS2, 24-784

24	KQSFEPEIEALKSFKNGISNDPLGVLSDW	TIIIGSLRHCNWTG	ITCDSTGHVVSVS	VSLLEKQ	83								
84	LEGVLSPA	IANLTYLQVLDLTSNSFTGKIPAEIGKLTELNL	Q	LYLNYFSGSIPSGIWEL	143								
144	KNIF	ILELAY	NLLSGDV	PEEICKTSSLV	FILFAYNNLTGKIP	ECLGDLVHLQ	LFI	AAGNH	203				
204	LTGS	IPVS	I	GT	LANLAVLN	LSGNQLTGKIP	PRDFGNLLNL	EVL	IL	TENLE	GDI	PAEIGNC	263
264	SSLV	I	LYDNQ	LTGKIP	AELGNLVQL	KILI	IFKNKLTSS	IPSSL	FRLTQL	TIL	ILAYNH	323	
324	LVGP	I	SEEIGFLES	LE	ILQLMFNNFTGEFP	Q	SITNLRNLT	TVL	IVI	HNNISGEL	PADLG	LL	383
384	TNLR	I	LMAH	DNLLT	GPIPSS	ISNCTGLK	I	ILSHNQMTGEI	PRGFGRMNLT	WIV	IRDNHF	443	
444	TGEI	PDDIFNC	SNLEV	VVADNNLT	GTLKPLIGKLQ	KLRLV	I	VSYNSLTG	PIP	REIGNL	K	503	
504	DLN	Q	LYLHSNG	FTGRI	PREMSNL	LLQGLRMYS	NDLEG	PIPEEM	FDMK	LLSV	DLSNNKF	563	
564	SGQI	PALFSK	LES	TYL	SLQGNKFNGS	IPASLKS	LSLLNTFD	ISDNLLT	GTL	IPGELL	ASL	623	
624	KNM	Q	LYLNFS	NNLLT	G	TIPKELG	KLEMVQEID	LSNNLFSGS	IPRS	LQACKNV	FTLDFSQ	N	683
684	NLSGHI	P	DEV	FQGMD	MIISLN	LSRNS	FSGEIP	QSFGNM	THL	VSDL	SSNNLT	GEIPESLA	743
744	NLSTLKHL	KLASNN	LKGHV	PESGVFK	NINAS	DLMG	NTDLC					784	

### 9.3. Eingefügte Mutationen

In Tabelle 10 sind die in FLS2\_3 eingefügten Mutationen dargestellt.

Tabelle 10: In FLS2\_3 eingefügte Mutationen.

Positions chain A (FLS2)	From	To	Positions chain A (FLS2)	From	To	Positions chain A (FLS2)	From	To
126	I	T	246	V	I	368	G	I
128	Y	L	268	Q	I	369	F	H
148	Y	I	270	E	A	388	N	I
150	D	E	291	Q	K	390	S	M
152	R	A	292	A	I	412	L	I
153	N	Y	294	R	I	414	D	I
172	L	F	296	Y	F	435	F	W
174	G	L	316	H	I	437	S	V
176	D	A	318	G	I	439	G	R
196	M	L	320	S	A	440	R	D
198	V	I	321	E	Y	459	T	V
219	T	A	340	V	I	461	S	V
220	D	V	342	T	Q	483	I	V
222	D	N	344	H	M	485	Q	I
243	Q	E	345	S	F	507	I	Q
244	S	V	366	T	I			

#### 9.4. erstes Docking

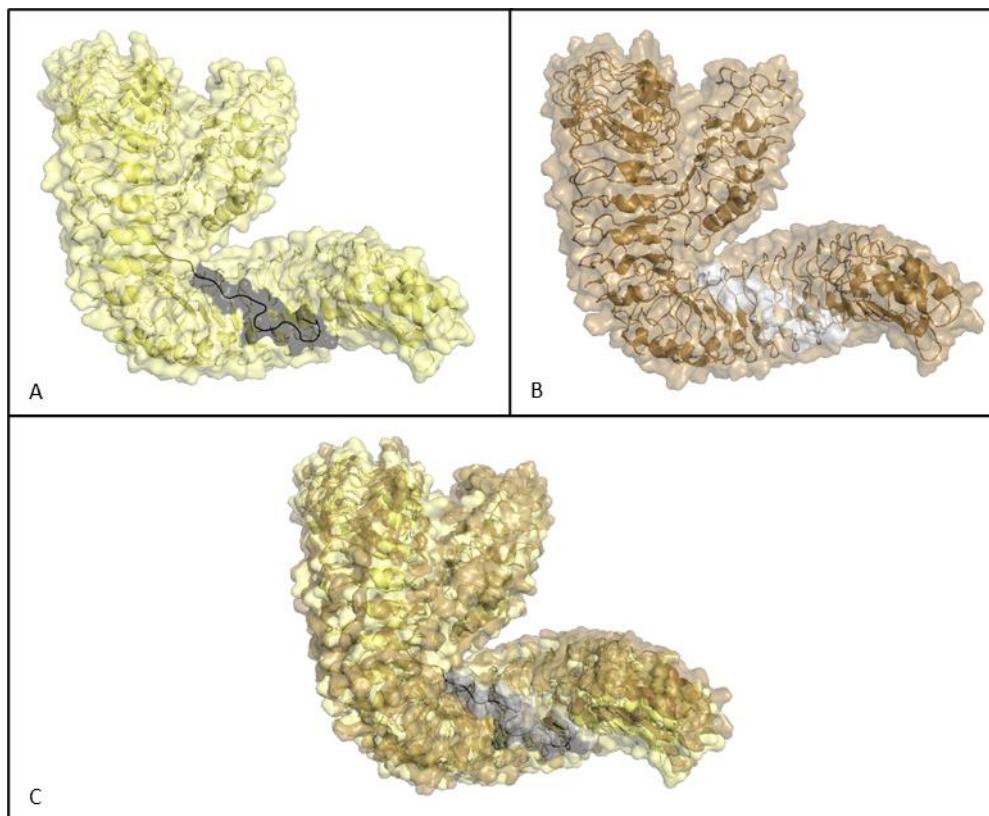


Abbildung 37: FLS2 mit BAK1 und dem eingesetzten Spike-Peptid 942 nach dem ersten Docking.

**A:** Zu sehen ist die Ausgangsstruktur von BAK1 mit FLS2 in Hellgelb mit dem eingesetzten 22 Aminosäuren langen Spike-Peptid 942 in grau. **B:** Zu sehen ist in Braun das FLS2 mit dem BAK1 und dem Peptid nach dem ersten Docking. **C:** Zu sehen sind die aus **A** und **B** überlagerten Strukturen. Es ist eine leichte Drehung im unteren Teil von FLS2 (C-Terminus) erkennbar.

## 9.5. erstes Design

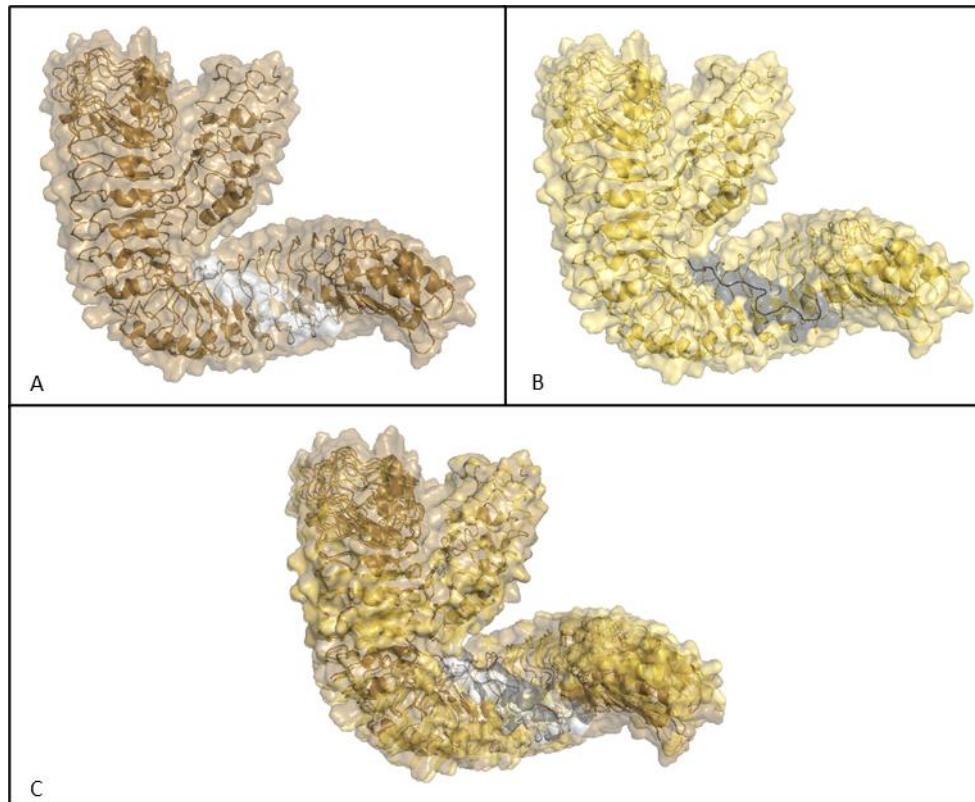


Abbildung 38: FLS2 mit BAK1 und dem eingesetzten Spike-Peptid 942 nach dem ersten Design.

**A:** Zu sehen ist die Struktur nach dem ersten Docking von BAK1 mit FLS2 in Braun mit dem eingesetzten 22 Aminosäuren langen Spike-Peptid 942 in Hellgrau. **B:** Zu sehen ist in Gelb das FLS2 mit dem BAK1 und dem Peptid nach dem ersten Design. **C:** Zu sehen sind die aus **A** und **B** überlagerten Strukturen. Es ist eine leichte Drehung im unteren Teil von FLS2 (C-Terminus) erkennbar. Außerdem liegt das Peptid nun etwas angeschmiegter am FLS2 als nach dem ersten Docking.

## 9.6. zweites Docking

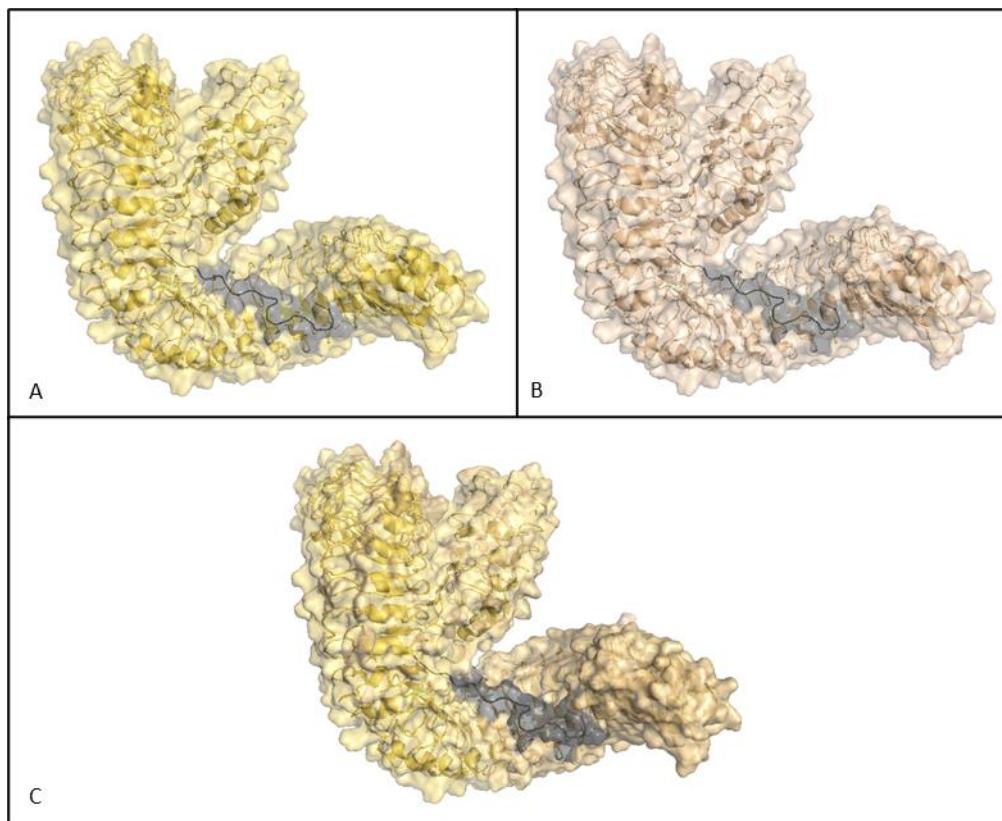


Abbildung 39: FLS2 mit BAK1 und dem eingesetzten Spike-Peptid 942 nach dem zweiten Docking.

**A:** Zu sehen ist die Struktur nach dem ersten Design von BAK1 mit FLS2 in Gelb mit dem eingesetzten 22 Aminosäuren langen Spike-Peptid 942 in Grau. **B:** Zu sehen ist in Hellbraun das FLS2 mit dem BAK1 und dem Peptid nach dem zweiten Docking. **C:** Zu sehen sind die aus **A** und **B** überlagerten Strukturen. Zwischen den beiden Schritten hat sich nicht viel getan.

## 9.7. zweites Design

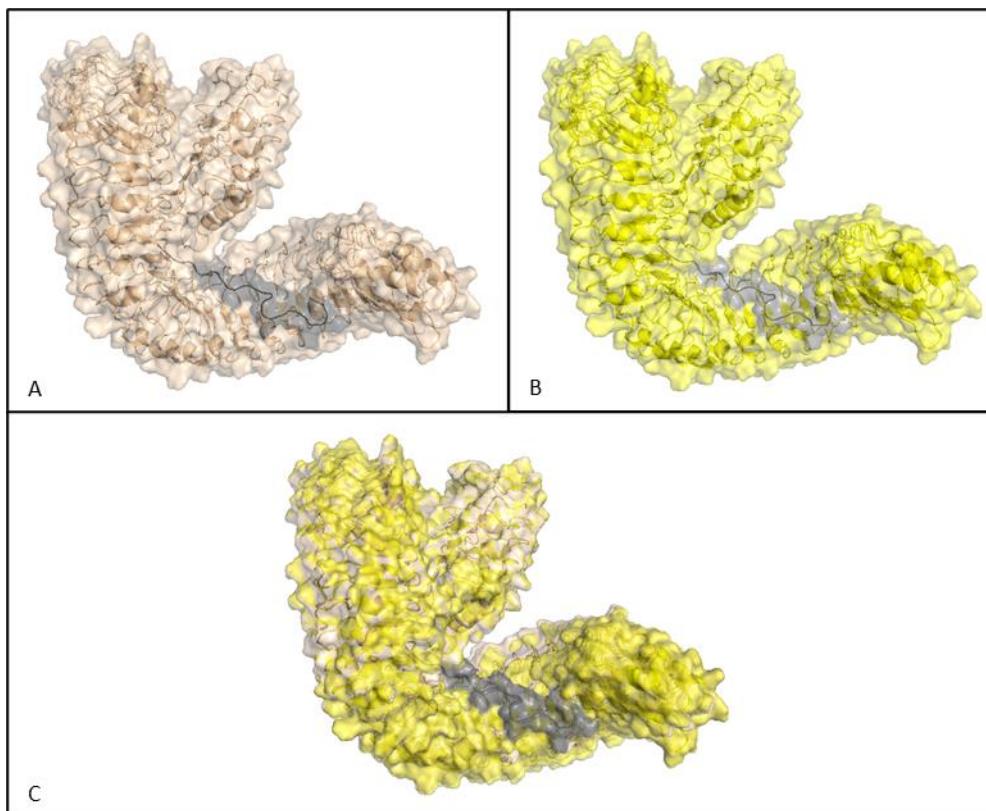


Abbildung 40: FLS2 mit BAK1 und dem eingesetzten Spike-Peptid 942 nach dem zweiten Design.

**A:** Zu sehen ist die Struktur nach dem zweiten Docking von BAK1 mit FLS2 in Hellbraun mit dem eingesetzten 22 Aminosäuren langen Spike-Peptid 942 in Grau. **B:** Zu sehen ist in Gelb das FLS2 mit dem BAK1 und dem Peptid nach dem zweiten Design. **C:** Zu sehen sind die aus **A** und **B** überlagerten Strukturen.

## 9.8. Final

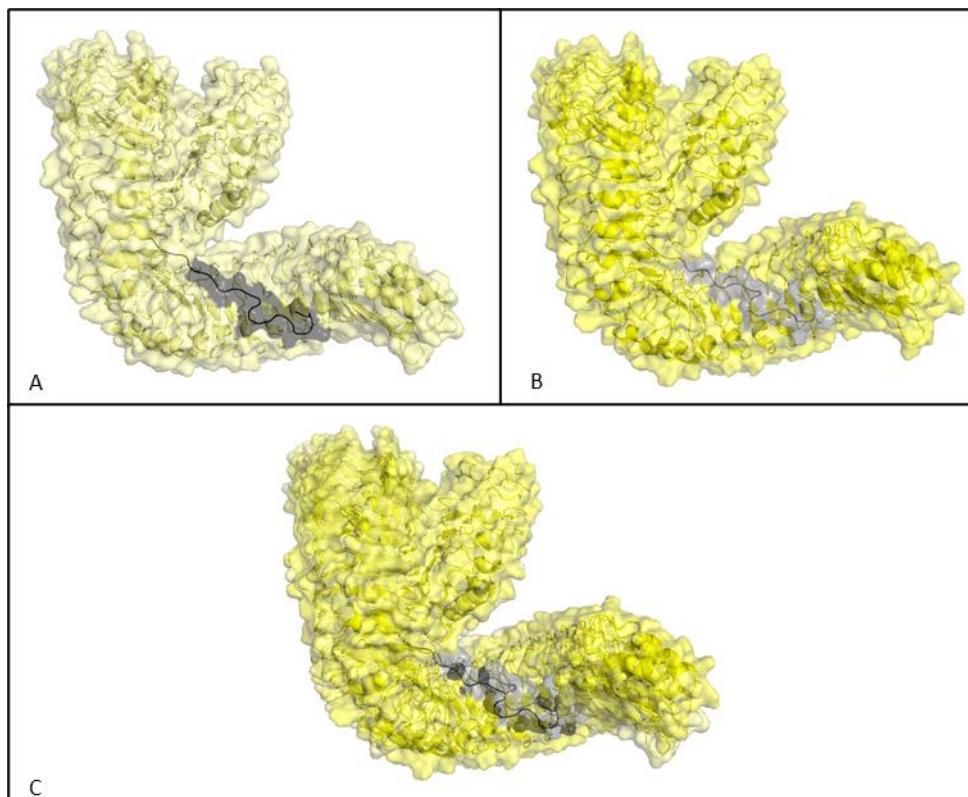


Abbildung 41: Vergleich der Ausgangs- mit der finalen Struktur von FLS2 mit BAK1 und dem eingesetzten Spike-Peptid 942.

**A:** Zu sehen ist die Ausgangsstruktur von BAK1 mit FLS2 in Hellgelb mit dem eingesetzten 22 Aminosäuren langen Spike-Peptid 942 in Dunkelgrau. **B:** Zu sehen ist in Gelb das FLS2 mit dem BAK1 und dem Peptid nach dem zweiten Design. **C:** Zu sehen sind die aus **A** und **B** überlagerten Strukturen. Zwischen den beiden Strukturen hat sich sowohl der FLS2-Rezeptor als auch das Peptid deutlich gedreht.

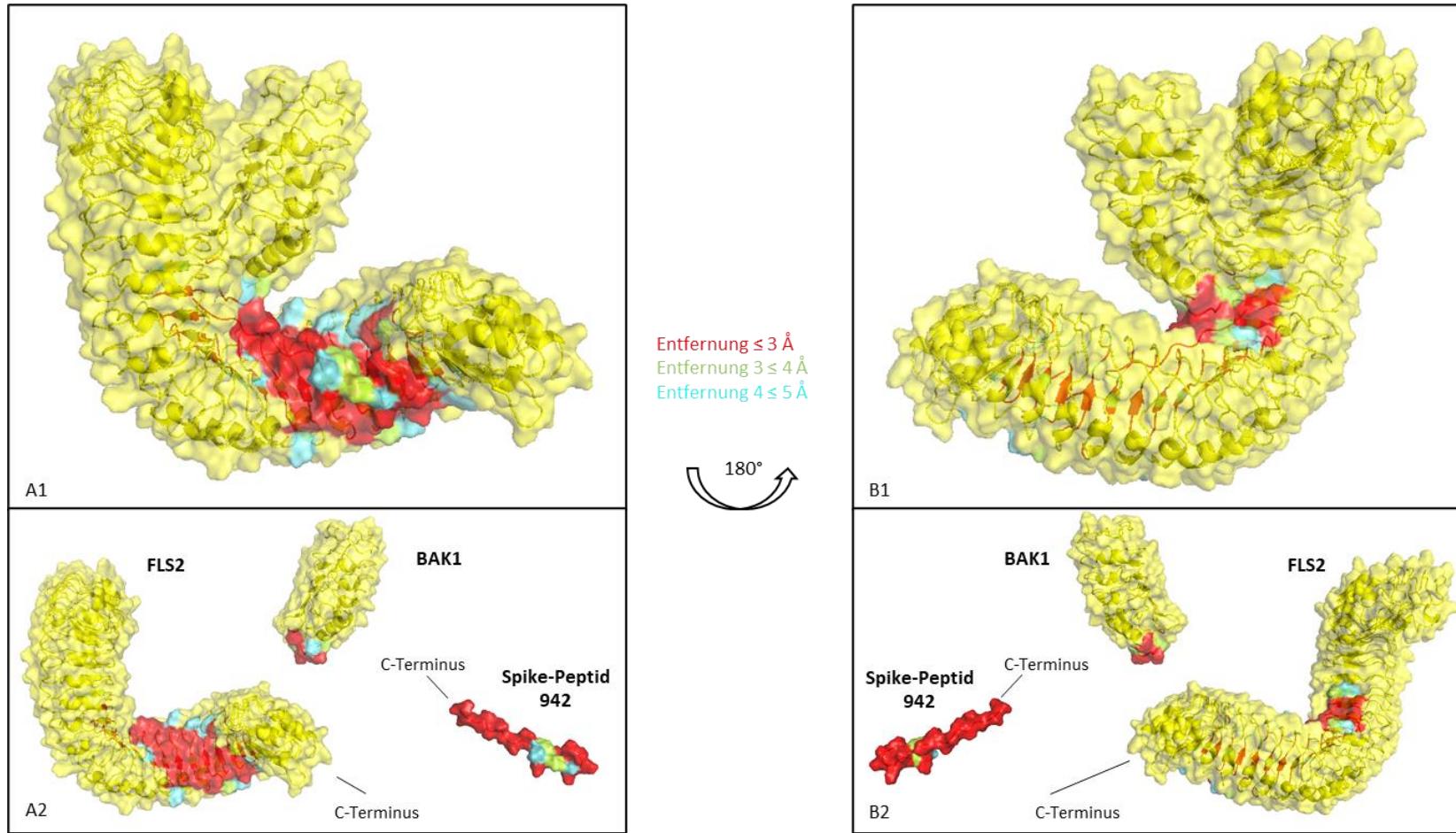


Abbildung 42: Darstellung der finalen Struktur mit der jeweiligen Bindefläche.

In Rot sind die Entferungen zwischen dem Peptid und BAK1 bzw. FLS2, die kleiner als  $3 \text{ \AA}$  betragen eingefärbt. In Grün sind die Entferungen zwischen Peptid und BAK1 bzw. FLS2, die zwischen  $3$  und  $4 \text{ \AA}$  betragen. In Blau sind die Entferungen zwischen Peptid und BAK1 bzw. FLS2, die zwischen  $4$  bis  $5 \text{ \AA}$  liegen. **A1:** Zu sehen ist die finale Struktur mit ihren eingefärbten Abständen. **A2:** Zu sehen sind aufgetrennten Proteine und das Spike-Peptid 942. Die Bereiche sind je nach ihrer Entfernung zueinander angefärbt. **B:** die um  $180^\circ$  gedrehten Strukturen von **A**.