

ITBC BI1 Python 1 en Basiskennis voor Bioinformatici

Weektaak 4

OWE1 Python 1 en Basiskennis voor Bioinformatici

Taak 4 – Analyse van de eiwitsequentie en structuur

Doelstellingen

Na afloop van deze taak kun je:

- In python eenvoudige scripts schrijven om sequentiedata te analyseren
- De opzet van een script uitwerken in pseudocode
- Het script testen en de resultaten van het script verifiëren met de waarden uit de literatuur
- Structuren van eiwitten opzoeken in de PDB database

Casus

De aminozuren waaruit een eiwit bestaat hebben verschillende eigenschappen. We hebben vorige week gekeken naar lading, maar hydrofobiciteit en grootte zijn ook kenmerken van een aminozuur.

In een eiwit zitten de aminozuren covalent aan elkaar gebonden door middel van peptidebindingen. Door de verschillende eigenschappen van de aminozuren zal een eiwit zich gaan vouwen. Het eiwit wordt op een bepaalde manier gevouwen door de verschillende soorten bindingen die kunnen optreden tussen de aminozuren: hydrofobe interacties, ion-bindingen, waterstofbruggen, van der Waals interacties. De vorm van het eiwit bepaald uiteindelijk de functie van het eiwit. Bijvoorbeeld bij een enzym kan pas in de biologisch actieve vorm het substraat binden en zijn de aminozuren die de enzymatische reactie uitvoeren zo gepositioneerd dat ze het substraat kunnen bewerken.

Opdrachten

Opdracht 1: Wat is het molecuul gewicht van het eiwit?

Omdat niet alle aminozuren dezelfde grootte hebben, hebben ze ook allemaal een ander molecuul gewicht.

- Bereken met een python script het molecuulgewicht (MW, eenheid = Da) van de 5 eiwitsequenties (het gekozen eiwit in 5 organismen) aan de hand van de molecuul gewichten van de verschillende aminozuren.
- Maak eerst een opzet voor het script met behulp van pseudocode.
- Welke tabel met molecuul gewichten gaan jullie als klas gebruiken? Hoeveel getallen achter de komma? Waarom deze?
- Test de werking van het script
- Verifieer de resultaten van het script met de molecuul gewichten van de eiwitten op Uniprot. Naast de sequentie vind je het molecuul gewicht van het hele eiwit: Mass (Da).

Opdracht 2: Hoe ziet de structuur van het eiwit eruit?

De PDB database (Protein Data Bank) bevat structuren van eiwitten. structuren van eiwitten worden gemaakt door met X-ray op een eiwit te stralen. Door op te vangen welke signalen niet terug komen kan precies de vorm van het eiwit worden bepaald. Om deze meting te doen, moet het eiwit stil liggen. Dat is best lastig, omdat alles in de natuur beweegt. Om te bereiken dat het eiwit stil ligt, proberen ze het eiwit te kristalliseren. Als dit lukt heb je een kristal bestaande uit alleen eiwit. Geen water, geen celmembranen of andere cel onderdelen. Alleen eiwit, dat netjes stil blijft liggen.

- Zoek de structuur van de het uitgekozen eiwit op in de PDB database.
- Van welke organismen is een structuur te vinden?
- Welk deel van het eiwit is te vinden als structuur?
- Zit het eiwit als monomeer in de structuur of is het als 'x'-meer gebonden aan zichzelf (homo-'x'-meer) of andere eiwitten (hetero-'x'-meer)?
- Op welke manier zitten de eiwitten van de homo- of heteromeer aan elkaar gebonden. Wat voor soort bindingen/interacties vinden er plaats tussen deze eiwitten?

Resultaat

Aan het eind van deze taak heb je

- een python script dat het molecuul gewicht van een eiwitsequentie kan uitrekenen.
- een opzet van het script in pseudocode.
- een vergelijking van de resultaten van het script met de waarden uit de literatuur.
- alle data overzichtelijk opgeslagen in Excel.
- het python script opgeslagen in GIT-classroom.
- de structuur van het eiwit met toelichting.

Presentatie

Presenteer je resultaten aan de tutorgroep. De tutor zal per projectgroep een student aanwijzen om het woord te doen. Van iedere toehoorder/student wordt verwacht dat hij kritische vragen stelt ten aanzien van de inhoud en/of de vorm van de presentatie.

Vergeet niet de bronvermelding in je presentatie (zie APA richtlijnen onder Algemene informatie op OnderwijsOnline).

Middelen

- PDB: <http://www.rcsb.org/pdb/home/home.do>
- PDBe: <https://www.ebi.ac.uk/pdbe/>
- EBI - Uniprot: <http://www.uniprot.org/>
- NCBI protein: <https://www.ncbi.nlm.nih.gov/protein/>
- Campbell et al. Biology, a global approach. Pearson, 11th edition, 2017, concept 5.4 blz 126-131.

Nabespreking

In de nabespreking en tijdens de presentaties komen onder andere de volgende punten aan de orde:

- Op welke manieren kan je het script testen?
- Komen de resultaten overeen met de waardes in Uniprot?
- Wat was eenvoudig en wat was lastig?
- Hoe verloopt de samenwerking in de projectgroep?

Copyright @ HAN, I. Paffen