

Protein-Datenbanken

Protein- Datenbanken

Christian Fink

Protein-Datenbanken

» Übersicht «

- PDB
- PDB_TM
- OPM
- HIC-UP
- Klotho

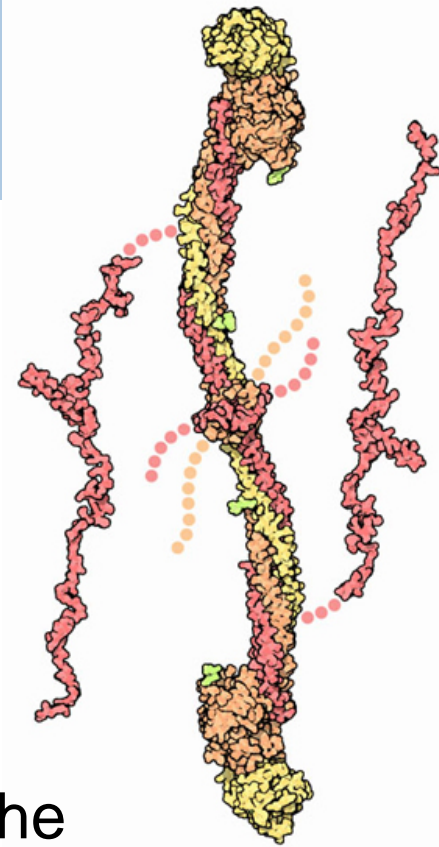
Protein-Datenbanken

» PDB «



PDB = Protein Data Bank

- 3D-Strukturen von Proteinen & Nukleinsäuren
- Gegründet 1971 als freies Archiv für biologische makromolekulare Strukturen
- 1974: 12 Strukturen (Hämoglobin, Myoglobin, usw.)
- Nov. 2006: 39969 Strukturen!!!



Protein-Datenbanken

» PDB «

- PDB liefert eine Reihe an Tools:
 - Browsen
 - Suchen
 - Berichten
 - Visualisieren
 - Erstellen
- PDB ist Teil von wwPDB – Aufgabe:
Pflege einer einzigen freien und global verfügbaren Datenbank

Protein-Datenbanken

» PDB «

- PDB ist **die** Ressource für Strukturbiologen uvm.
- Zahllose ähnliche Datenbanken auf Basis von PDB
- PDB speichert die genaue Position der Atome!

Protein-Datenbanken

» PDB «

	Proteine	Nukleinsäuren	Proteinkomplexe	Sonstige	Total
X-Ray	30746	931	1421	28	33126
NMR	4853	726	122	6	5707
EM	91	10	33	0	134
Sonstiges	77	4	3	0	84
Total	35767	1671	1579	34	39051

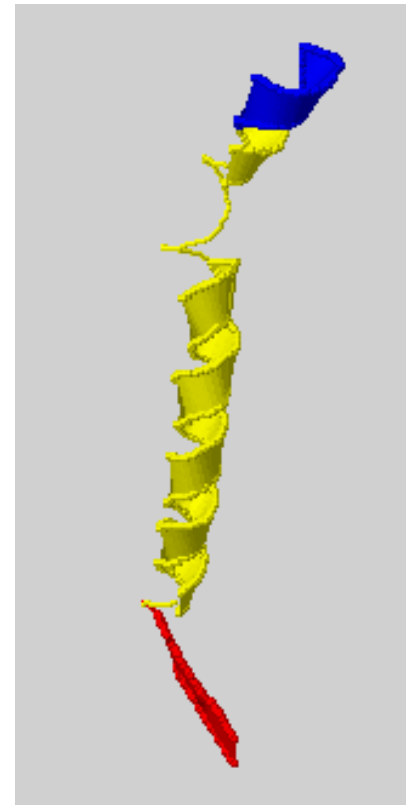
Protein-Datenbanken

» PDB_TM «



PDB_TM = Transmembrane Proteins in the PDB

- Verwaltet vom Institut für Enzymologie
- Auszug aus normaler PDB
- Nur Transmembranproteine (alpha & beta)
- Resultat regelmäßiger Scans von PDB-Daten



Protein-Datenbanken

» PDB_TM «

TMDET-Algorithmus

- Algorithmus zur Untersuchung der Proteine
- Unterscheidung durch Koordinaten und Identifikation von Transmembransegmenten (sogar in Fällen unkompletter Strukturen oder schlechten Aufösungen)
- Vermeidet aufwendige, manuelle Expertenabschätzung

Protein-Datenbanken

» PDB_TM «

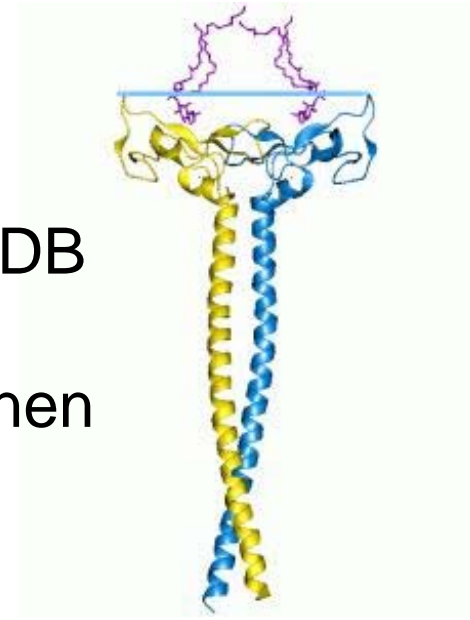
- Aktuell: 687 Transmembranproteine
- 569 Alpha-Helix Proteine
- 110 Beta-Barrel Proteine
- Suche nach PDB-Identifizier, PDB-Keyword oder Typ des TM-Proteins
- Visualisierung durch Java-Applet

Protein-Datenbanken

» OPM «

OPM = Orientations of Proteins in Membranes DB

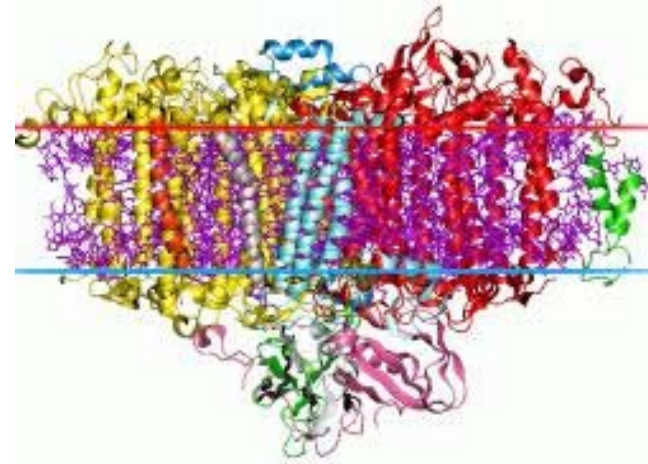
- Enthält Orientierungsinformationen zu Proteinen bzgl. der Membranschichten
- Sammlung von Transmembran- und Peripheräproteinen sowie Membranaktiven Peptiden
- Orientierung theoretisch berechnet und experimentell nachgeprüft



Protein-Datenbanken

» OPM «

- Datenbank wird manuell gepflegt
- Gesamtzahl der Proteine in OPM:
629 Einträge (Stand: 9.11.06)
- OPM untersucht Orientierungen von
Quartärstrukturen, weniger einzelne
Domänen oder Untereinheiten



Protein-Datenbanken

» OPM «

Datenbank erlaubt Analyse, Sortierung und Suche von Membranproteinen nach:

- Strukturelle Klassifikation
- Spezies
- Zielmembran
- Zahl der Transmembransegmente und Subunits
- Zahl der Sekundärstrukturen
- Hydrophobische Dicke
- Neigungswinkel zur Membran



Protein-Datenbanken

» OPM «

Visualisierung:

- Individuelle Webseite mit Infos und Bildern (QUANTA)
- 3D Darstellung durch Jmol, WebMol & MDL Chime
- Smarty Template Framework mit PHP und MySQL
- XHTML, CSS, Javascript

Protein-Datenbanken

» HIC-UP «



HIC-UP = Hetero-compound Information
Centre, Uppsala

- Freie Datenbank mit „hetero-compounds“
(small molecules)
- Gerard Kleywegt – „Department of Cell and
Molecular Biology“, Uppsala University
- Mehrmals im Jahr aktualisiert

Protein-Datenbanken

» HIC-UP «

- Enthält Segmente von PDB-Dateien (Lipide)
- Für komplette Proteine → Normale PDB
- Verwendung für Modellierung von Membranen
- Lokalisierung von Proteinen in der Zelle

Protein-Datenbanken

» HIC-UP «

Enthaltene Informationen zu jedem Compound:

- Koordinaten (PDB und Textdateien)
- Visualisierung (Chime und VRML)
- Dictionary Daten (X-PLOR/CNS, O, TNT)
- Links zu weiteren Datenbanken und Servern (PDBsum, EDS, PRODRG, Relibase, MSDchem, ChemDB, Jena HCD, usw.)
- Sonstige Daten und Informationen

Protein-Datenbanken

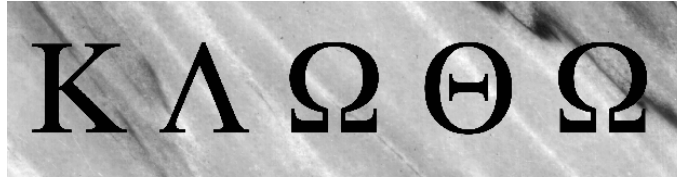
» HIC-UP «

Suchmöglichkeiten in HIC-UP:

- QuickXS Mechanismus (z.B. ATP)
- Restgruppenname
- Trivialname (z.B. Benzen)
- Chemische Formel (z.B. $C_6 H_{12} O_6$)
- Zahl der Nicht-Wasserstoffatome
- Indexlisten von chemischen Zusammensetzungen

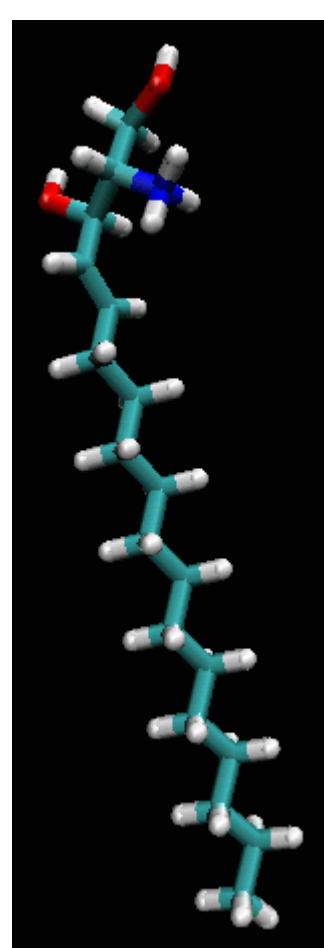
Protein-Datenbanken

» Klotho «



Klotho = Tochter Zeus' !!!

- „Biochemical Compounds Declarative Database“
- Klotho - eines von drei Teilen des Moirai-Projekts
- Tools zum Erstellen und Erkennen von Molekülstrukturen
- Tools für eine effektive Suche



Protein-Datenbanken

» Quellen «

- <http://www.rcsb.org/pdb/home/home.do>
- Kleywegt, G.J. and Jones, T.A. (1998). Databases in protein crystallography. *Acta Cryst D54*, 1119-1131
- <http://www.biocheminfo.org/klotho/>
- Lomize MA, Lomize AL, Pogozheva ID, Mosberg HI (2006) OPM: Orientations of Proteins in Membranes database. *Bioinformatics* 22, 623-625.
- <http://pdbtm.enzim.hu/>