

Übungen zur Vorlesung Algorithmische Bioinformatik

Freie Universität Berlin, WS 2016/17

Martin Vingron · Annalisa Marsico · Alena van Bömmel · Edgar Steiger · Thimo Wellner

Blatt 13 · Ausgabe am 23.1.2017

Abgabe am 30.1.2017 vor Beginn der Vorlesung

Name:

Matrikelnummer:

Übungsgruppe:

Aufgabe 1 (*Bonus, 20 Punkte; Theorie*). Lesen Sie den Review „The ABCs (and XYZs) of peptide sequencing“ von H. Steen und M. Mann¹. Beantworten Sie dann folgende Fragen **kurz** und mit Ihren eigenen Worten.

1. Was ist das Ziel einer Mass-Spektrometrie?
2. Warum werden Peptide und nicht ganze Proteine sequenziert?
3. Für welchen Prozess haben John B. Fenn, Koichi Tanaka und Kurt Wüthrich den Chemie-Nobelpreis im Jahr 2002 erhalten? Erklären Sie kurz diesen Prozess.
4. Ist es theoretisch möglich, die Aminosäuresequenz aus dem Spektrum zu identifizieren? Warum? Was erschwert diese Identifizierung in der Praxis?
5. Was sind die a_m -, b_m - und c_m -Ionen? Wie werden sie erhalten?
6. Was sind die $x_{(n-m)}$ -, $y_{(n-m)}$ - und $z_{(n-m)}$ -Ionen?
7. Erklären Sie die Abbildung 3 (a,b,c). Was wird dort dargestellt? Beschreiben Sie die Achsen in den Plots.
8. Was ist der Unterschied zwischen der absoluten und der relativen Quantifizierung?

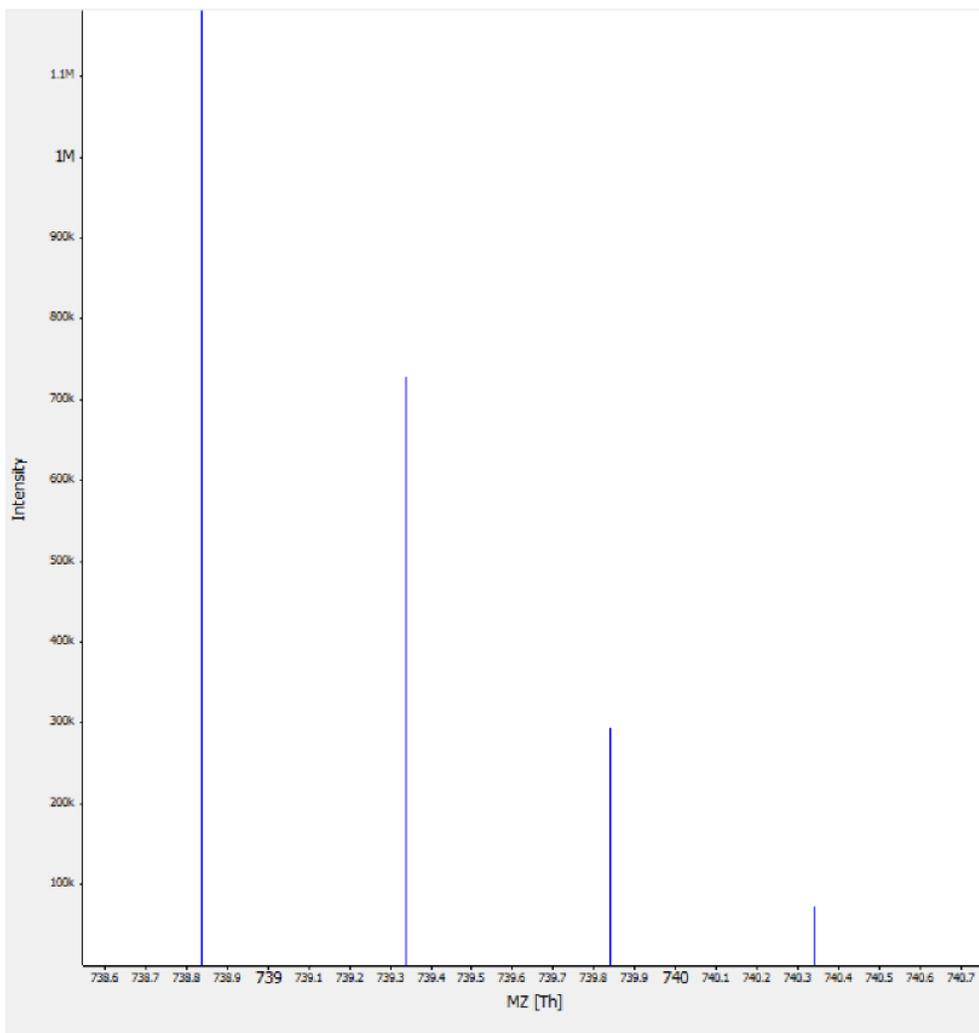
Aufgabe 2 (*30 Punkte; Theorie*). In der Vorlesung wurden verschiedene Masse-Begriffe erläutert.

1. Was ist der Unterschied zwischen der *exact mass*, der *accurate mass* und dem *molecular weight* eines Moleküls?
2. Berechnen Sie die *average* und die *monoisotopic mass* von CO_2 . Wie groß ist die *nominal mass* von Deuterium?
3. Angenommen, wir haben ein Peptid mit 7 verschiedenen Aminosäuren, die jeweils unterschiedliche Masse besitzen. Wie viele solcher Peptide gleicher Länge, gleicher Aminosäure-Komposition und mit gleicher Masse (*isobaric peptides*) gibt es?
4. Sie wollen $^{13}C^{16}O$ und $^{12}C^{17}O$ anhand ihrer Masse identifizieren. Wie hoch muss die Auflösung ihrer Maschine in *kg* sein, damit Sie die Massen der beiden Moleküle unterscheiden können?

¹Material 1 https://www.molgen.mpg.de/3730145/natrevmolcellbiol_2004_steen_mann.pdf

Aufgabe 3 (30 Punkte; Theorie). Über den Mass-to-charge Ratio lässt sich aus den Isotopenmustern die Masse bestimmen.

1. Gegeben sei eine atomare Masse von 180Da und eine Ladung von +3. Was ist der Mass-to-charge Ratio?
2. Ermitteln Sie aus folgendem Spektrum die Ladung des Peptids anhand des Abstands zwischen den Isotopenpeaks.



3. Berechnen Sie für obiges Spektrum die *monoisotopic mass*.

Aufgabe 4 (40 Punkte; Theorie). Mit Hilfe des *Average*-Modells (durchschnittliche Aminosäure) kann man Rückschlüsse auf die Komposition eines Peptides machen. Ein Average hat folgende Elementhäufigkeiten:

C: 4.9384; H: 7.7583; N: 1.3577; O: 1.4773; S: 0.0417

Die Masse eines Average ist ca. $111.1254Da$.

1. Gegeben sei ein Peptide mit einer Masse von $1666.881Da$. Aus wie vielen Averages besteht das Peptid? Wie viele Schwefelelemente wird dieses Peptid wahrscheinlich enthalten?
2. Bestimmen Sie die molekulare Formel und die monoisotopische Masse folgender künstlicher Peptide. Nutzen Sie dazu die Tabelle auf <http://www.webqc.org/aminoacids.php>.

PEPVIDEYDANVVK
MACCAMMACCACP

3. Bestimmen Sie nun die molekulare Formel der beiden Peptide basierend auf dem Average-Model.
4. Schätzen Sie für jedes Element den Fehler in den Häufigkeiten der Elemente.