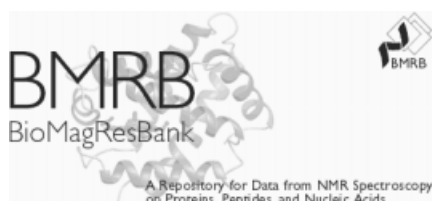




NMR-Daten biologischer Makromoleküle

Den meisten an biologischen Makromolekülen interessierten Internet-Benutzern ist die Protein Data Bank („PDB“, <http://www.rcsb.org/pdb/>) als zentrale Sammel- und Auskunftsstätte für Strukturfragen von Proteinen sicherlich ein Begriff. Weniger bekannt dagegen ist, dass die PDB einen kleineren Vetter hat: die vor allem vom National Institute of Health (NIH, USA) geförderte Datenbank „BioMagResBank“ als



Sammelstätte für NMR-Daten biologischer relevanter Makromoleküle aus der Literatur. Schwerpunkt der BioMagResBank ist die Sammlung von chemischen Verschiebungsparametern (^1H , ^{13}C , ^{15}N und ^{31}P) von Aminosäuren, Peptiden, Proteinen und Nucleinsäuren. Zurzeit (März 2002) sind etwa 2000

NMRBrowse

List of 4 Matching ID Codes

1161_bacteraeichodopsis
1162_bacteraeichodopsis
1163_bacteraeichodopsis
1164_bacteraeichodopsis

Display Options

List Protein ☐ Sort by ID ☐ Add Constraints ☐ Apply Constraints ☐ Search Full BMRB ☐

Search Criteria

Accession: Author: Email:

Protein:

pH higher than pH lower than

temperature higher than temperature lower than

Abbildung 1. Suchmaske der BioMagResBank.

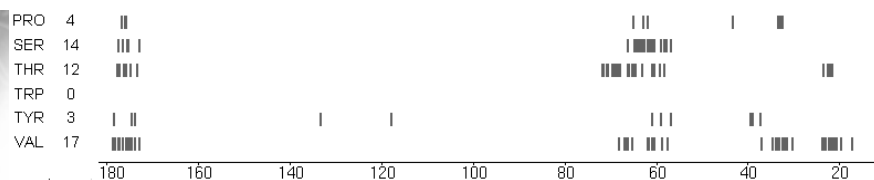


Abbildung 2. Chemische Verschiebungen (^{13}C) eines Komplexes von Phosphotransferase, sortiert nach den Aminosäuren (Ausschnitt).

Proteine und Peptide sowie 52 Datensätze mit DNA- und 19 Datensätze mit RNA-Parametern in der Datenbank erfasst. Für einen kleinen Teil dieser Einträge finden sich zusätzlich zu den chemischen Verschiebungen noch die skalaren und dipolaren Kopplungen oder T_1 - und T_2 -Relaxationszeiten. Der Großteil der Datensätze enthält direkte Verweise auf die zugehörigen Strukturdateien in der PDB-Datenbank. Diese Links erlauben es dem Benutzer, sich auf einfache Weise die zugehörigen räumlichen Strukturen des Proteins anzuschauen und so z.B. Korrelationen zwischen chemischer Verschiebung und molekularer Konformation zu untersuchen.

Wie jede Datenbank hat auch die BioMagResBank eingebaute Suchfunktionen. Das intuitiv einfachste Suchwerkzeug ist hinter den Links Retrieve und Query Grid Interface in Form von anklickbaren Tabelleneinträgen von der Homepage aus erreichbar. Bei diesen Tabellen sind in der Art eines Schachbretts in der Horizontalen die Biopolymerklassen und in der Vertikalen die NMR-Parameter-Typen aufgetragen, wodurch sich auf sehr einfache Weise bestimmte Gruppen von Daten selektieren lassen. Das zweite und vielseitigste Werkzeug versteckt sich hinter den Links Retrieve und NMR Data Browser. Folgt man diesen, so stößt man auf eine sehr komfortable Eingabemaske (Abbildung 1), die eine gezielte Suche nach Suchkriterien wie Autor, Name, Temperatur oder pH ermöglicht. Auf Wunsch werden die einzelnen Felder entweder mit einer Und- oder mit einer Oder-Verknüpfung kombiniert. Als drittes Suchwerkzeug gibt es unter den Links Retrieve und FASTA Search noch die Möglichkeit, nach Proteinen und Nucleinsäuren anhand von Sequenzähnlichkeiten zu suchen, wobei die gewünschte Sequenz in einem Suchfenster als Einbuchstabencode eingegeben wird.

Auf die Datensätze kann auf unterschiedliche Art zugegriffen werden. Zunächst können die Daten direkt durch interaktive Java-Anwendungen aufbereitet und graphisch dargestellt werden (Abbildung 2). Für die meisten Benutzer dürften diese Zugriffsmöglichkeiten auf die Daten völlig ausreichend sein. Sollen die Daten jedoch auf komplexere Weise analysiert werden, so besteht als Alternative zu den Java-Applets die Möglichkeit, die Datensätze aus dem Browser heraus als Text-Dateien auf den eigenen Rechner herunter zu laden, um sie dort anschließend selbst zu analysieren. Für die Analyse dieser Daten steht unter den Links Tools und Documentation eine ausführliche Beschreibung der Struktur der Dateien sowie eine Software-Bibliothek mit Zugriffsroutinen zur Verfügung, die das Schreiben eigener Programme zur Datenanalyse ermöglichen.

Mit ihrer Datenmenge stellt die BioMagResBank die wahrscheinlich größte frei zugängliche Ressource an NMR-Daten von Biomolekülen dar. Diese Datensammlung ist natürlich zunächst für den NMR-Spektroskopiker und NMR-Anwender interessant, der sich mit der Untersuchung dieser Substanzklassen beschäftigt. Durch ihre vielfältigen Abfragemöglichkeiten und eingebauten Analysetools bietet sie allerdings auch für Ausbildungszwecke, z.B. Übungen oder Praktika zur instrumentellen Analytik, ein sehr interessantes Anwendungspotential, insbesondere wegen ihrer intuitiven Bedienung und interaktiven graphischen Abfragemöglichkeiten.

Gerd Buntkowsky und Thomas Emmler
Freie Universität Berlin

Für weitere Informationen besuchen Sie:

<http://www.bmrw.wisc.edu>
oder nehmen Sie Kontakt auf mit
marhley@nmrfam.wisc.edu