

Übungen zur Vorlesung Algorithmische Bioinformatik

Freie Universität Berlin, WS 2014/15

Martin Vingron · Juliane Perner · Annkatrin Bressin

Blatt 13 · Ausgabe am 19.01.2015

Abgabe am 26.01.2015 vor Beginn der Vorlesung

Name:

Matrikelnummer:

Übungsgruppe:

Aufgabe 1 (40 Punkte; Theorie). Mit Hilfe des *Averagine*-Modells (durchschnittliche Aminosäure) kann man Rückschlüsse auf die Komposition eines Peptids machen. Ein *Averagine* hat folgende Elementhäufigkeiten:

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

Die Masse eines *Averagine* ist ca. 111.1254 Da.

1. Gegeben sei ein Peptid mit einer Masse von 1666.881 Da. Aus wie vielen *Averaginen* 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 *Averagine*-Modell.
4. Schätzen Sie für jedes Element den Fehler in den Häufigkeiten der Elemente.

Aufgabe 2 (35 Punkte; Theorie). Sie möchten ein theoretisches Spektrum des Peptids

ACLHVR

konstruieren. Nehmen Sie an, dass alle Fragmente eine Ladung von +1 haben.

1. Nehmen Sie an, dass es zwei Peaks mit nominalen m/z -Werten von 172 und 343 im Spektrum gibt. Können diese Peaks vom selben Peptid kommen? Begründen Sie ihre Antwort.
2. Zeichnen Sie die theoretisch möglichen Bruchstellen, die zu den a -, b -, c - und x -, y -, z -Fragmenten führen, in die Peptid-Strukturformel ein.
3. Berechnen Sie die *mass-to-charge ratios* der folgenden Ionen: $a_3, b_2, b_4, b_5, c_4, y_3, y_4, y_5$. Nutzen Sie dazu folgende *nominal residual masses*: A:71, C: 103, L: 113, H: 137, V: 99, R: 156, N-terminale Gruppe: 1, C-terminale Gruppe: 17. Nehmen Sie außerdem an, dass A Residue 1 ist.

Aufgabe 3 (25 Punkte; Theorie). In der Vorlesung wurde X!Tandem zum Identifizieren eines Peptids vorgestellt. Sie haben nun folgende Spektren gegeben:

1. Experiment (m/z; Intensität):

(227.3, 50), (321.3, 30), (330.5, 20), (374.7, 90), (418.7, 100),
(544.7, 60), (593.7, 30), (685.7, 20), (839.0, 70)

2. Theorie mit Ladung 1 für die *b*- und *y*-Fragmente (m/z):

227, 276, 330, 375, 490, 544, 593, 650

Nehmen Sie eine Massentoleranz von $0.5Da$ an und berechnen Sie das X!Tandem-Dotproduct für beide Spektren.