

# Einführung

## AST Übung

# Übung

# Rahmen

- Timur ([olzhabaev@zbh.uni-hamburg.de](mailto:olzhabaev@zbh.uni-hamburg.de))
- Vertiefung einzelner Vorlesungsthemen
- Input, Übungsblatt
- Fragen + Diskussion (relevant für Prüfung)

# OLAT

- <https://www.openolat.uni-hamburg.de>
- "67-104 Angewandte Bioinformatik: Strukturen"
- UHH Anmeldedaten
- Vorlesungsfolien, Übungsblätter und -folien, Zusatzmaterialien
- Nicht in Stine

# Rechnernutzung

# Rechner

- Vorsichtiger Umgang
  - Bei Problemen melden
  - Nach beenden der Arbeit, **Rechner nicht herunterfahren**
- ⇒ Nur Benutzer abmelden, Bildschirm ausschalten
- Gemäßigtes Drucken auf **tiber2ps**

# Linux

- Freies Betriebssystem
- Bewährt in Naturwissenschaften / Informatik
- Heutzutage nicht unbequem

# Software

- Startmenu (unten links bzw. win-Taste)
- Dateimanager (dolphin bzw. Ordnersymbol)
  - Desktopumgebung startet alles mit **einem** Klick
- Firefox
- Text editor (kate)
- Libreoffice (writer  $\approx$  Word, calc  $\approx$  Excel)



# Kommandozeile

- CLI, terminal...
- Textbasiertes Rechner- und Programminterface
- Konsole

## Kommandozeile Navigation

- Befindet sich immer "in" einem Verzeichnis im Dateisystem (links in der Eingabeaufforderung)
- Beginnt im Home-Verzeichnis des angemeldeten Benutzers
- Auflisten von Dateien und Unterverzeichnissen: `ls`
- Erstellen von Verzeichnissen: `mkdir verzeichnisname`
- Wechseln von Verzeichnissen (relativ zum aktuellen)  
`cd pfad/zum/verzeichnis`
- Übergeordnetes Verzeichnis: `..`

## Kommandozeile Navigation Beispiel

```
mkdir AST
```

```
ls
```

... das neu erstellte Verzeichnis sollte neben den Standardverzeichnissen auftauchen

```
cd AST
```

```
ls
```

... sollte leer sein

```
cd ..
```

## Starten von Programmen aus der Kommandozeile

- Dateinamen als Argumente
- Beispiel: `kate text_datei.txt`
- ⇒ Öffnet Datei `text_datei.txt` mit dem Texteditor (bzw. erstellt sie neu)
- **Blockiert** die Kommandozeile, bis das Programm beendet wird
- "&" als letztes Argument bewirkt Start im Hintergrund
- Beispiel: `kate text_datei.txt &`

# Strukturen

---

# Strukturbioinformatik

Hauptsächlich:

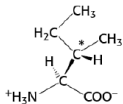
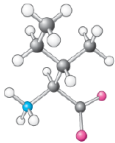
- Proteine
- RNA
- Liganden / Substrate

Manchmal:

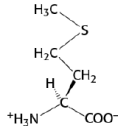
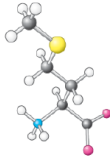
- DNA
- Lipide

# Aminosäuren

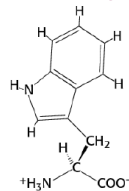
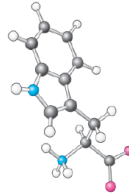
**Isoleucin**  
(Ile, I)



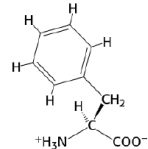
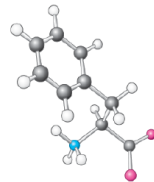
**Methionin**  
(Met, M)



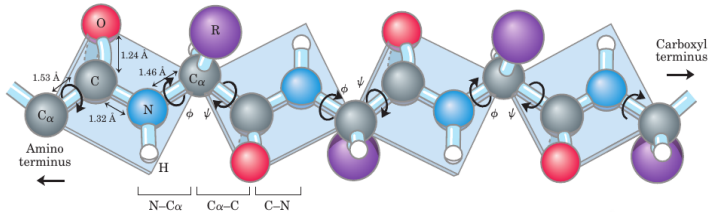
**Tryptophan**  
(Trp, W)



**Phenylalanin**  
(Phe, F)



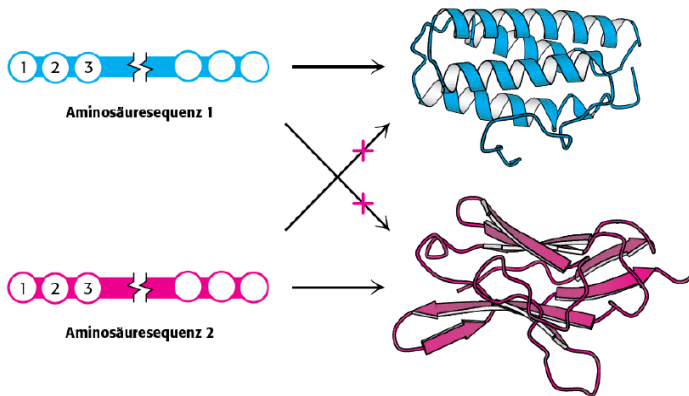
# Polypeptidkette



David L Nelson, Albert L Lehninger, and Michael M Cox. *Lehninger principles of biochemistry*. Macmillan, 2008.

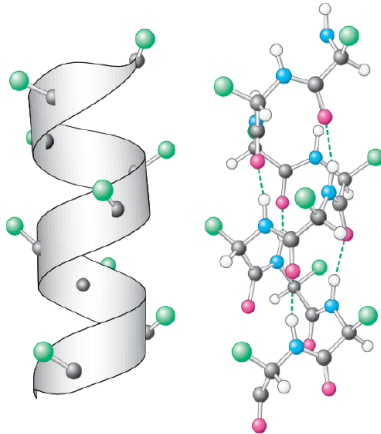


# Proteinfaltung



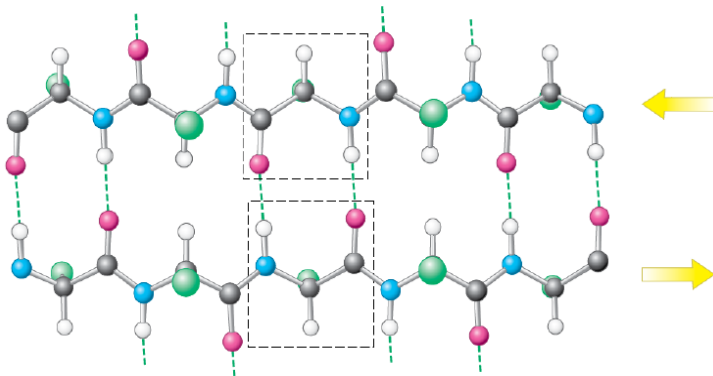
Jeremy M Berg, Lubert Stryer, and John L Tymoczko. *Stryer biochemie*. Springer-Verlag, 2015.

# $\alpha$ -Helix



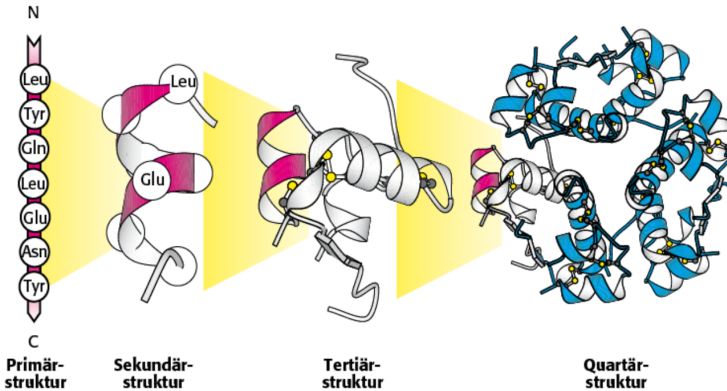
---

Jeremy M Berg, Lubert Stryer, and John L Tymoczko. *Stryer biochemie*. Springer-Verlag, 2015.

$\beta$ -Faltblatt

Jeremy M Berg, Lubert Stryer, and John L Tymoczko. *Stryer biochemie*. Springer-Verlag, 2015.

# Proteinstruktur



Jeremy M Berg, Lubert Stryer, and John L Tymoczko. *Stryer biochemie*. Springer-Verlag, 2015.

# UCSF Chimera

---

## UCSF Chimera

- Interaktive Visualisierung und Analyse von Molekülstrukturen und -sequenzen
- Verfügbar unter: <https://www.cgl.ucsf.edu/chimera/>
- Großer Teil der Übungen wird *Chimera* ausgiebig nutzen
- Steuerung über Menus und / oder interne Kommandozeile - wichtig mit beidem umzugehen

Heute und nächste Woche: Vertraut machen mit *Chimera*

## Starten von Chimera

```
/usr/local/zbhtools/chimera/1.13/bin/chimera &
```

Fehlermeldung bzgl. OpenGL kann erscheinen - ignorieren