

Paul M. Selzer
Richard J. Marhöfer
Oliver Koch

Angewandte Bioinformatik

Eine Einführung

2., überarbeitete und aktualisierte Auflage

 Springer Spektrum

Inhaltsverzeichnis

1	Die biologischen Grundlagen der Bioinformatik	1
	<i>Paul M. Selzer, Richard J. Marhöfer und Oliver Koch</i>	
1.1	Nukleinsäuren und Proteine	2
1.2	Aufbau der Nukleinsäuren DNA und RNA	2
1.3	Die Speicherung der genetischen Information	5
1.4	Aufbau der Proteine	7
1.4.1	Primärstruktur	7
1.4.2	Sekundärstruktur	9
1.4.3	Tertiär- und Quartärstruktur	11
1.5	Übungen	12
	Literatur	12
2	Biologische Datenbanken	15
	<i>Paul M. Selzer, Richard J. Marhöfer und Oliver Koch</i>	
2.1	Biologisches Wissen wird in globalen Datenbanken gespeichert	16
2.2	Primäre Datenbanken	17
2.2.1	Nukleotidsequenzdatenbanken	17
2.2.2	Proteinsequenzdatenbanken	22
2.3	Sekundäre Datenbanken	26
2.3.1	PROSITE	26
2.3.2	PRINTS	27
2.3.3	Pfam	28
2.3.4	Interpro	28
2.4	Genotyp-Phänotyp-Datenbanken	28
2.4.1	PhenomicDB	29
2.5	Molekülstruktur-Datenbanken	30
2.5.1	Protein Data Bank	30
2.5.2	Datenbank Structural Classification of Proteins 2	32
2.5.3	CATH	32
2.5.4	PubChem	33
2.6	Übungen	34
	Literatur	35
3	Sequenzvergleiche und sequenzbasierte Datenbanksuchen	37
	<i>Paul M. Selzer, Richard J. Marhöfer und Oliver Koch</i>	
3.1	Paarweise und multiple Sequenzvergleiche	38
3.2	Datenbanksuchen mit Nukleotid- und Proteinsequenzen	44
3.2.1	Wichtige Algorithmen zur Datenbanksuche	47
3.3	Software zur Sequenzanalyse	48
3.4	Übungen	50
	Literatur	51

4	Die Entschlüsselung eukaryotischer Genome	53
	<i>Paul M. Selzer, Richard J. Marhöfer und Oliver Koch</i>	
4.1	Die Sequenzierung kompletter Genome	54
4.2	Die Charakterisierung von Genomen mit STS- und EST-Sequenzen	54
4.2.1	Sequence Tagged Sites sind Orientierungspunkte im menschlichen Genom	54
4.2.2	Expressed Sequence Tags	55
4.3	Durchführung eines EST-Projekts	57
4.4	Die Identifizierung unbekannter Gene	59
4.5	Die Entdeckung von Spleißvarianten	62
4.6	Genetische Ursachen für individuelle Unterschiede	63
4.6.1	Pharmakogenetik	65
4.6.2	Personalisierte Medizin und Biomarker	69
4.6.3	Next Generation Sequencing	70
4.6.4	Proteogenomik	72
4.7	Übungen	73
	Literatur	74
5	Proteinstrukturen und Proteinstruktur-basiertes rationales Wirkstoffdesign	77
	<i>Paul M. Selzer, Richard J. Marhöfer und Oliver Koch</i>	
5.1	Proteinaufbau	78
5.2	Signalpeptide	78
5.3	Transmembranproteine	81
5.4	Proteinstrukturanalysen	82
5.4.1	Proteinmodellierung	82
5.4.2	Die Bestimmung von Proteinstrukturen im Hochdurchsatzverfahren	83
5.5	Proteinstrukturbasiertes rationales Wirkstoffdesign	84
5.5.1	Ein Docking-Beispiel mit DOCK	85
5.5.2	Ein Docking-Beispiel mit GOLD	86
5.5.3	Pharmakophor-Modelle und Suchen	89
5.5.4	Erfolge des strukturbasierten rationalen Wirkstoffdesigns	90
5.6	Übungen	91
	Literatur	92
6	Die funktionelle Analyse von Genomen	95
	<i>Paul M. Selzer, Richard J. Marhöfer und Oliver Koch</i>	
6.1	Die Identifizierung der zellulären Funktionen von Genprodukten	96
6.1.1	Transkriptomik	97
6.1.2	Proteomik	106
6.1.3	Metabolomik	115
6.1.4	Phenomik	117
6.2	Systembiologie	120
6.3	Übungen	123
	Literatur	125

7	Vergleichende Genomanalysen	127
	<i>Paul M. Selzer, Richard J. Marhöfer und Oliver Koch</i>	
7.1	Das Zeitalter der Genomsequenzierung	128
7.2	Wirkstoffforschung am Zielprotein	128
7.3	Vergleichende Genomanalysen geben Aufschluss über die Biologie von Organismen	130
7.3.1	Die Genomstruktur	130
7.3.2	Codierende Regionen	132
7.3.3	Nicht codierende Regionen	132
7.4	Vergleichende Stoffwechselanalysen	133
7.4.1	Kyoto Encyclopedia of Genes and Genomes	137
7.5	Gruppen orthologer Proteine	139
7.6	Übungen	142
	Literatur	143
	Serviceteil	145
	Lösungen zu den Übungen	146
	Glossar	167
	Sachverzeichnis	181