



叶酸多聚谷氨酸加尾酶 ATDFB的生物信息学分析

报告人：二组徐潮

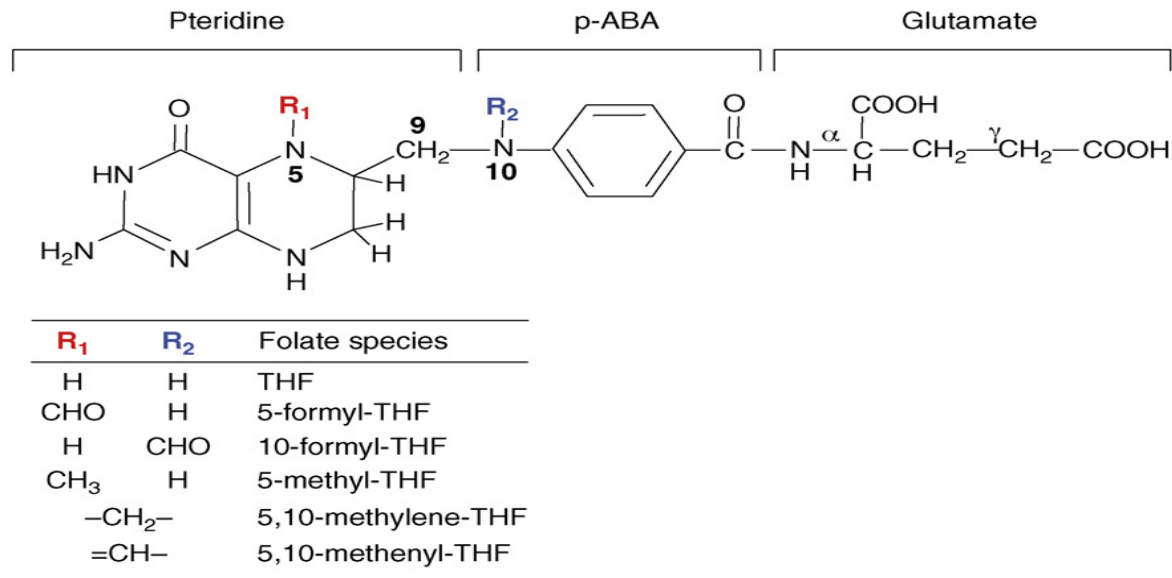
李真 张硕 许博思 徐潮

2012年2月21日



主要内容

- 背景知识
- 序列比对
- 构建进化树
- 预测三维结构
- 预测信号肽



TRENDS in Plant Science

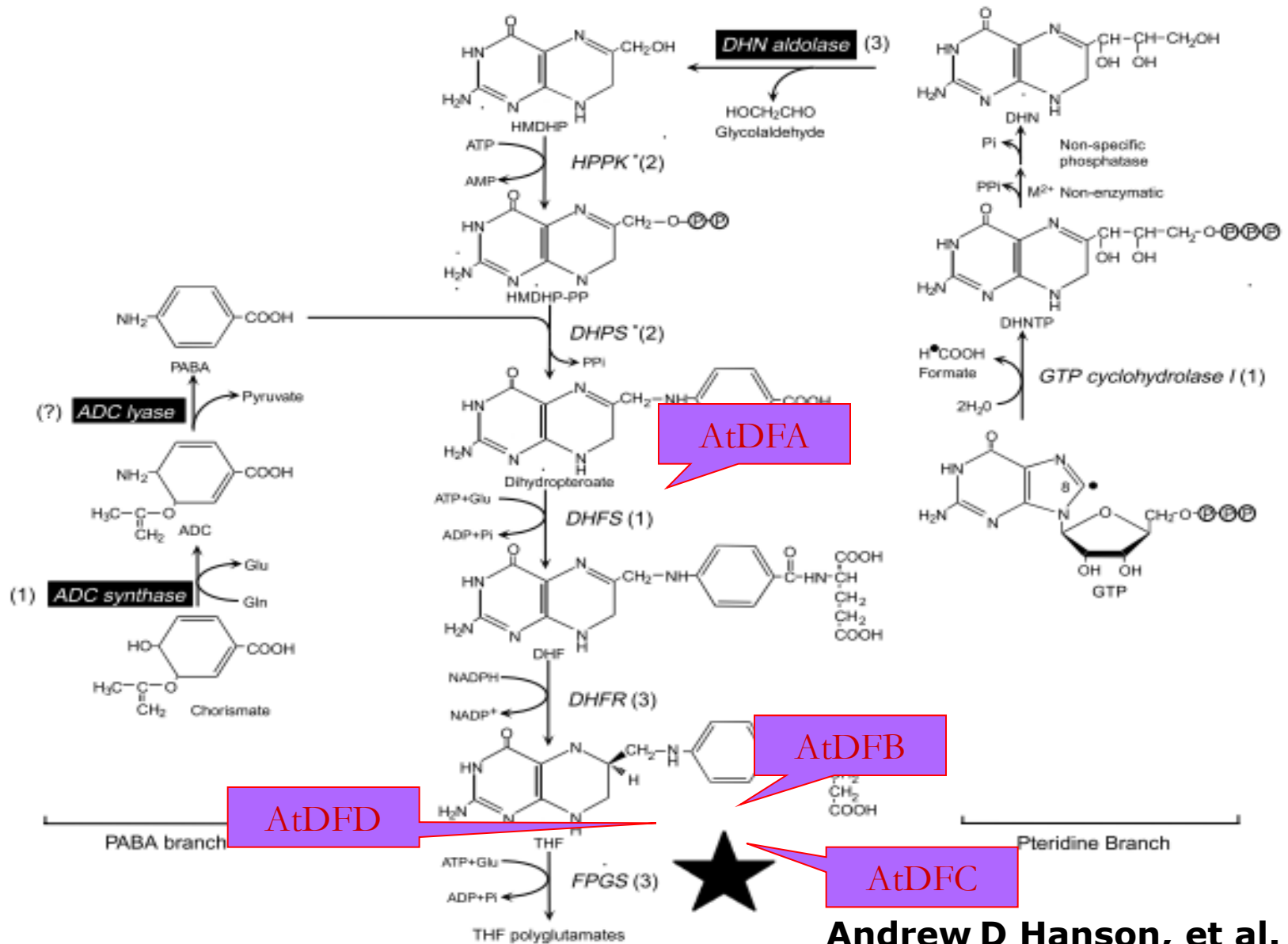
图1 叶酸的化学结构 叶酸分子由三部分组成：蝶啶、p-ABA、谷氨酸。图中所展示的四氢叶酸（THF）为单谷氨酸形式，植物中的叶酸可以在第一个谷氨酸的γ位连上最多6个谷氨酸。不同氧化水平的一碳单位可以连到N-5和/或N-10上，如图中R1和R2所表示的位置。在结构公式下列出了一碳单位的自然形式。蝶啶环可以以四氢、二氢和完全氧化的形式存在。（Bekaert et al., 2007）



背景介绍

- 叶酸是一种广泛分布的一种 B 族维生素，在一碳单位的代谢中起作用。
- 叶酸对孕妇尤其重要，如在怀孕头3个月内缺乏叶酸，可导致胎儿神经管发育缺陷，从而增加裂脑儿，无脑儿的发生率。
- 人无法自身合成叶酸，所以必须依靠日常饮食获得，缺乏叶酸可引起巨红细胞性贫血以及白细胞减少症，还会导致身体无力、易怒、没胃口以及精神病症状。

叶酸合成





主要内容

- 背景知识
- 序列比对
- 构建进化树
- 预测三维结构
- 预测信号肽

序列比对 (BCD)

UniProt > UniProtKB

Search

Blast

Align

Retrieve

ID Mapping *

Search in

Query

Protein Knowledgebase (UniProtKB) ▾

ATDF*

Search

Advanced Search »

Clear

18 results for **ATDF*** in **UniProtKB** sorted by **score** descending ☒

Browse by [taxonomy](#), [keyword](#), [gene ontology](#), [enzyme class](#) or [pathway](#) | Reduce sequence redundancy to [100%](#), [90%](#) or [50%](#)

Results [Customize](#)

> Show only [reviewed \(4\)](#) ★ (UniProtKB/Swiss-Prot) or [unreviewed \(14\)](#) ★ (UniProtKB/TrEMBL) entries

> Restrict term "atdf" to [gene name \(4\)](#)

	Entry	Entry name	Status	Protein names	Gene names	Organism
<input checked="" type="checkbox"/>	F4K2A1	FPGS1_ARATH	★	Folypolyglutamate synthase	FPGS1 ATDFB DFB FPGS2 FPGSB At5g05980 K18J17.17	Arabidopsis thaliana (Mouse-ear cress)
<input checked="" type="checkbox"/>	F4J2K2	FPGS2_ARATH	★	Folypolyglutamate synthase	FPGS2 ATDFC DFC FPGS3 FPGSC At3g10160 T22K18.1	Arabidopsis thaliana (Mouse-ear cress)
<input checked="" type="checkbox"/>	Q8W035	FPGS3_ARATH	★	Folypolyglutamate synthase	FPGS3 ATDFD DFD FPGS4 FPGSD At3g55630 F1I16_40	Arabidopsis thaliana (Mouse-ear cress)



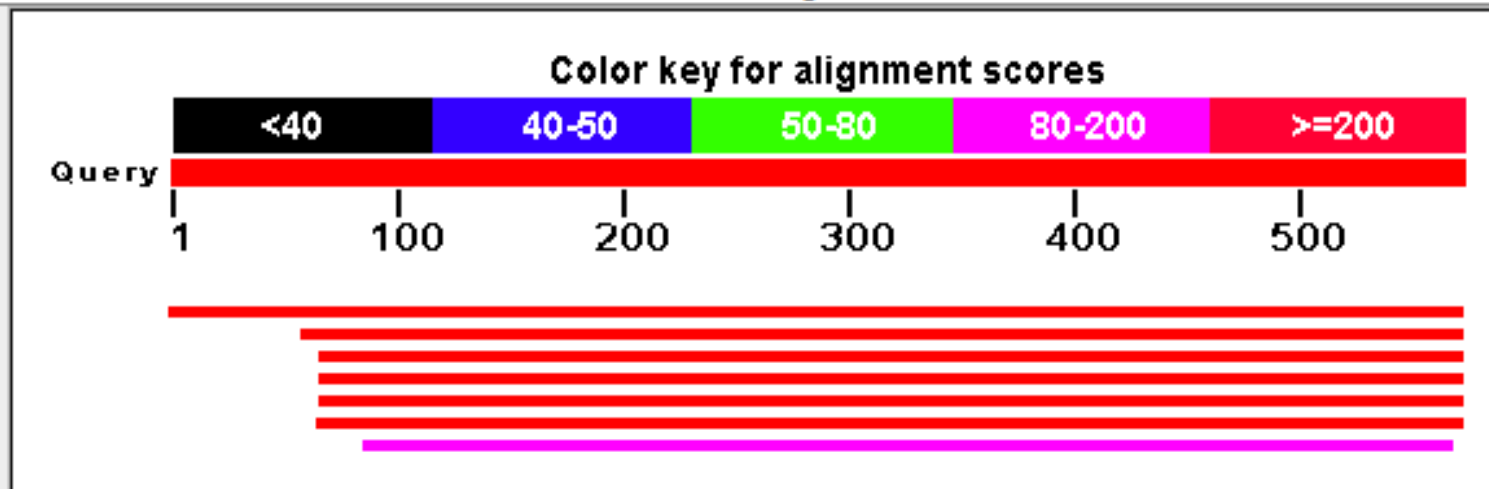
主要内容

- 背景知识
- 序列比对
- 构建进化树
- 预测三维结构
- 预测信号肽

BLAST比对结果

Distribution of 7 Blast Hits on the Query Sequence

Mouse-over to show details and scores, click to show alignments



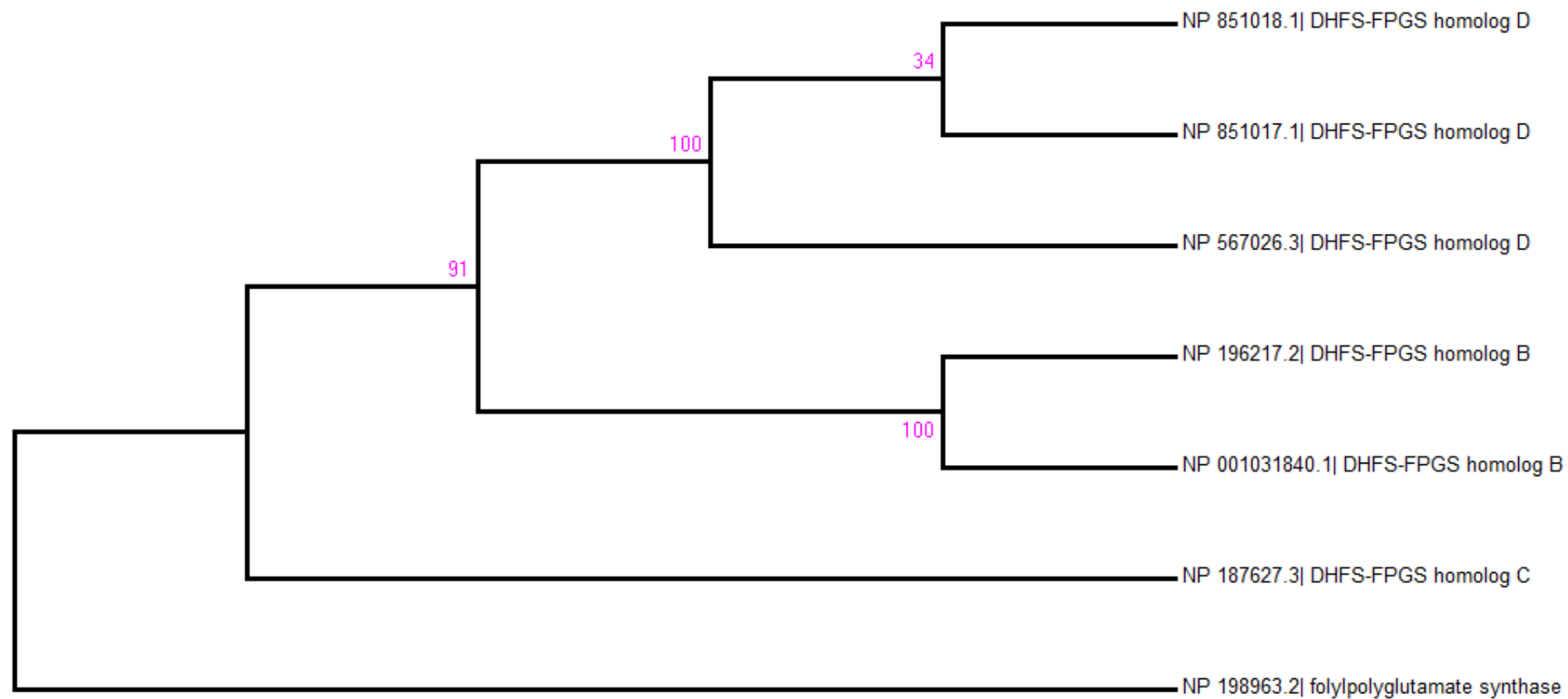
 Sequences producing significant alignments with E-value BETTER than threshold

Accession	Description	Max score	Total score	Query coverage	E value	Max ident	Links
NEW <input checked="" type="checkbox"/> NP_196217.2	DHFS-FPGS homolog B [Arabidopsis thaliana]	1143	1143	100%	0.0	100%	UGM
NEW <input checked="" type="checkbox"/> NP_001031840.1	DHFS-FPGS homolog B [Arabidopsis thaliana]	1023	1023	89%	0.0	100%	UGM
NEW <input checked="" type="checkbox"/> NP_567026.3	DHFS-FPGS homolog D [Arabidopsis thaliana]	588	588	88%	0.0	60%	UGM
NEW <input checked="" type="checkbox"/> NP_851018.1	DHFS-FPGS homolog D [Arabidopsis thaliana]	583	583	88%	0.0	60%	UGM
NEW <input checked="" type="checkbox"/> NP_851017.1	DHFS-FPGS homolog D [Arabidopsis thaliana]	540	540	88%	0.0	57%	UGM
NEW <input checked="" type="checkbox"/> NP_187627.3	DHFS-FPGS homolog C [Arabidopsis thaliana]	532	532	88%	0.0	53%	UGM
NEW <input checked="" type="checkbox"/> NP_198963.2	folypolyglutamate synthase [Arabidopsis thaliana]	134	134	84%	3e-37	26%	UGM

Run PSI-Blast iteration 2 with max



进化树分析

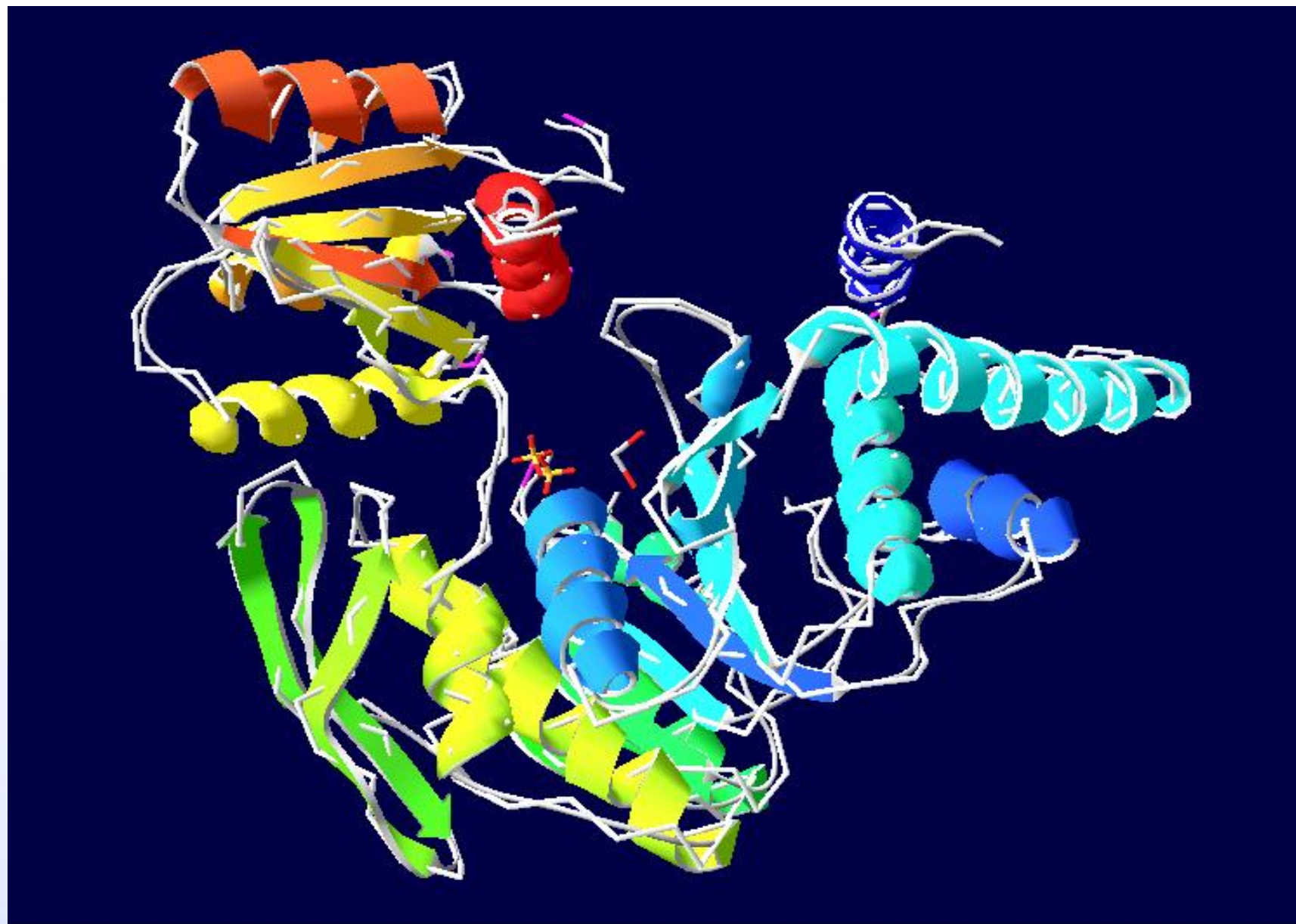




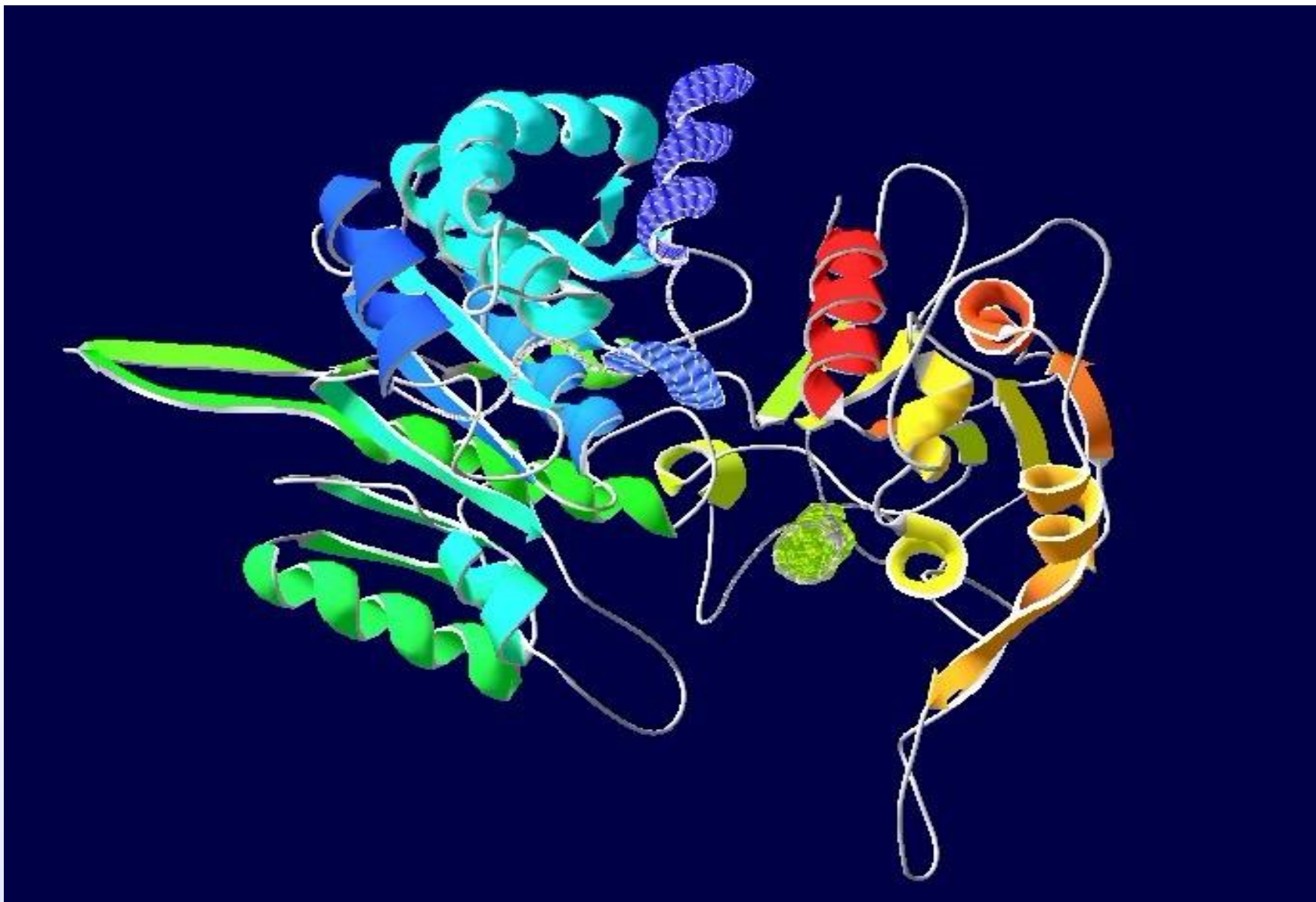
主要内容

- 背景知识
- 序列比对
- 构建进化树
- 预测三维结构
- 预测信号肽

细菌中的叶酸多聚谷氨酸合成酶



ATDFB的三维结构预测图



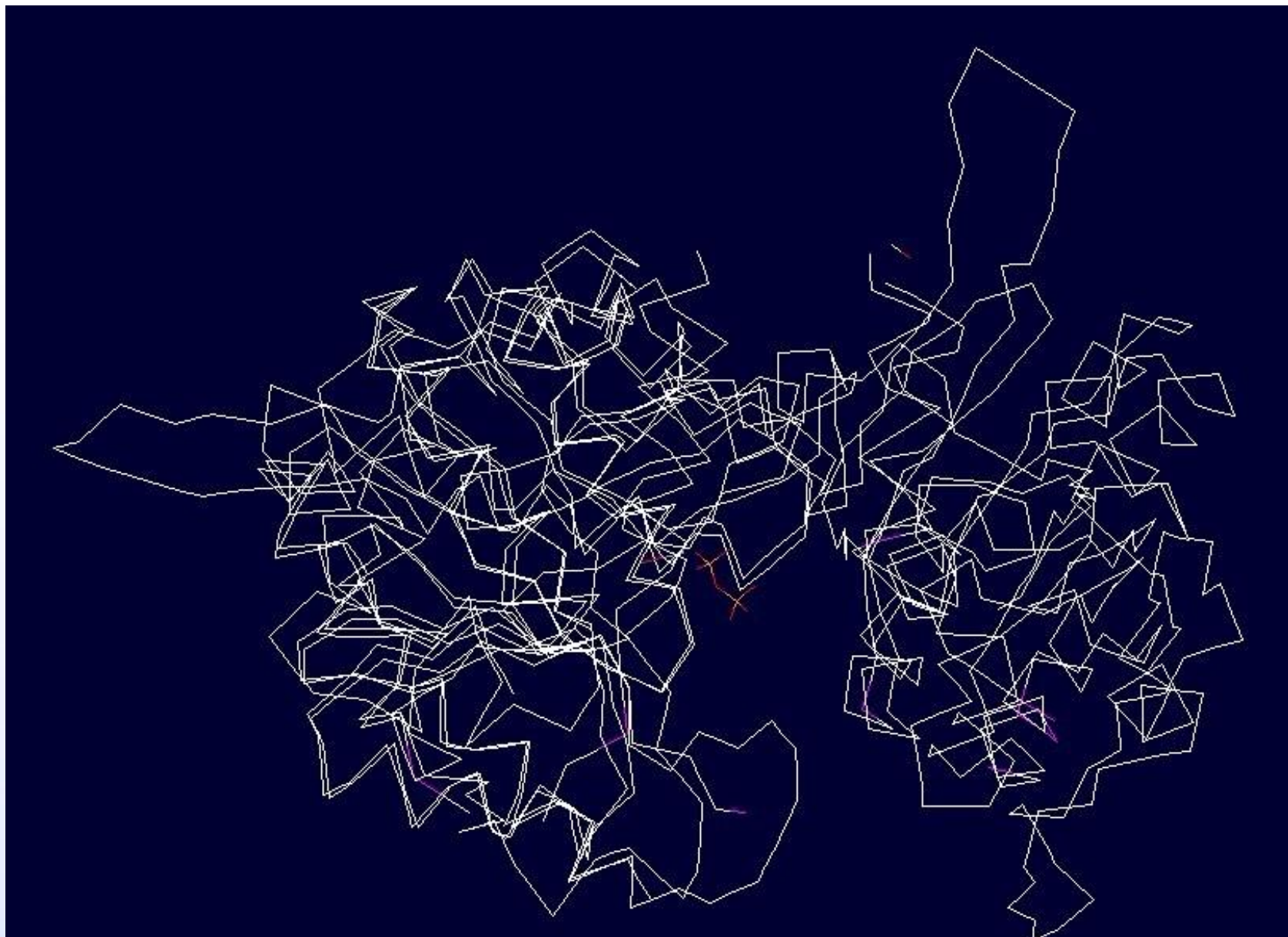


ATP结合位点





fit结果



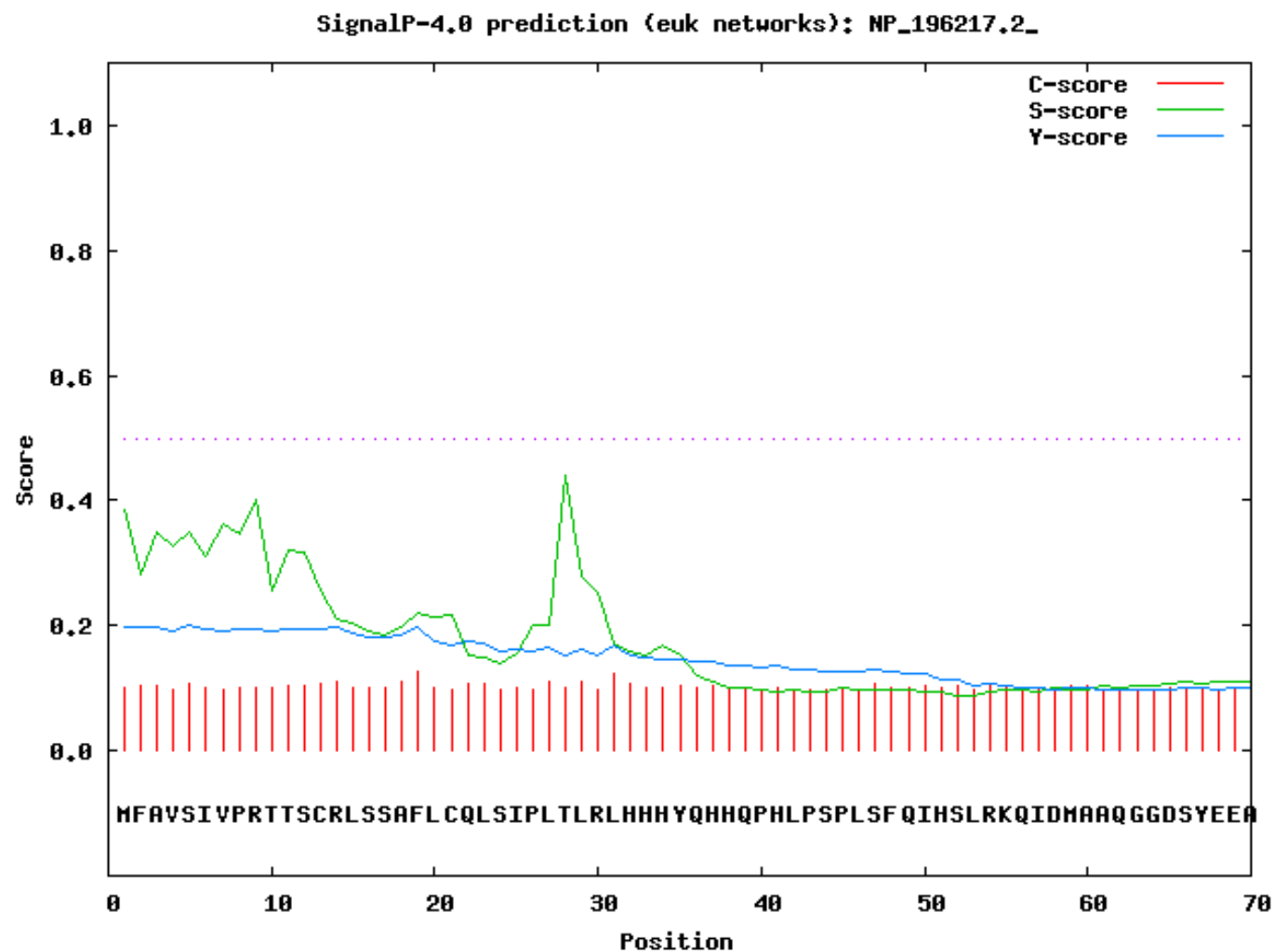


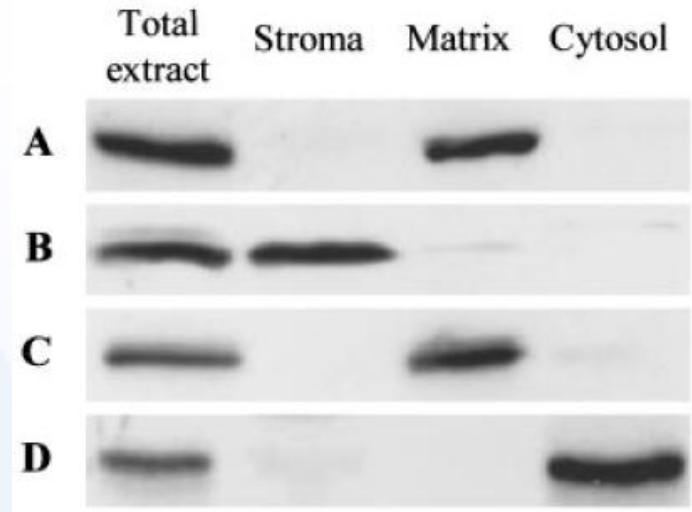
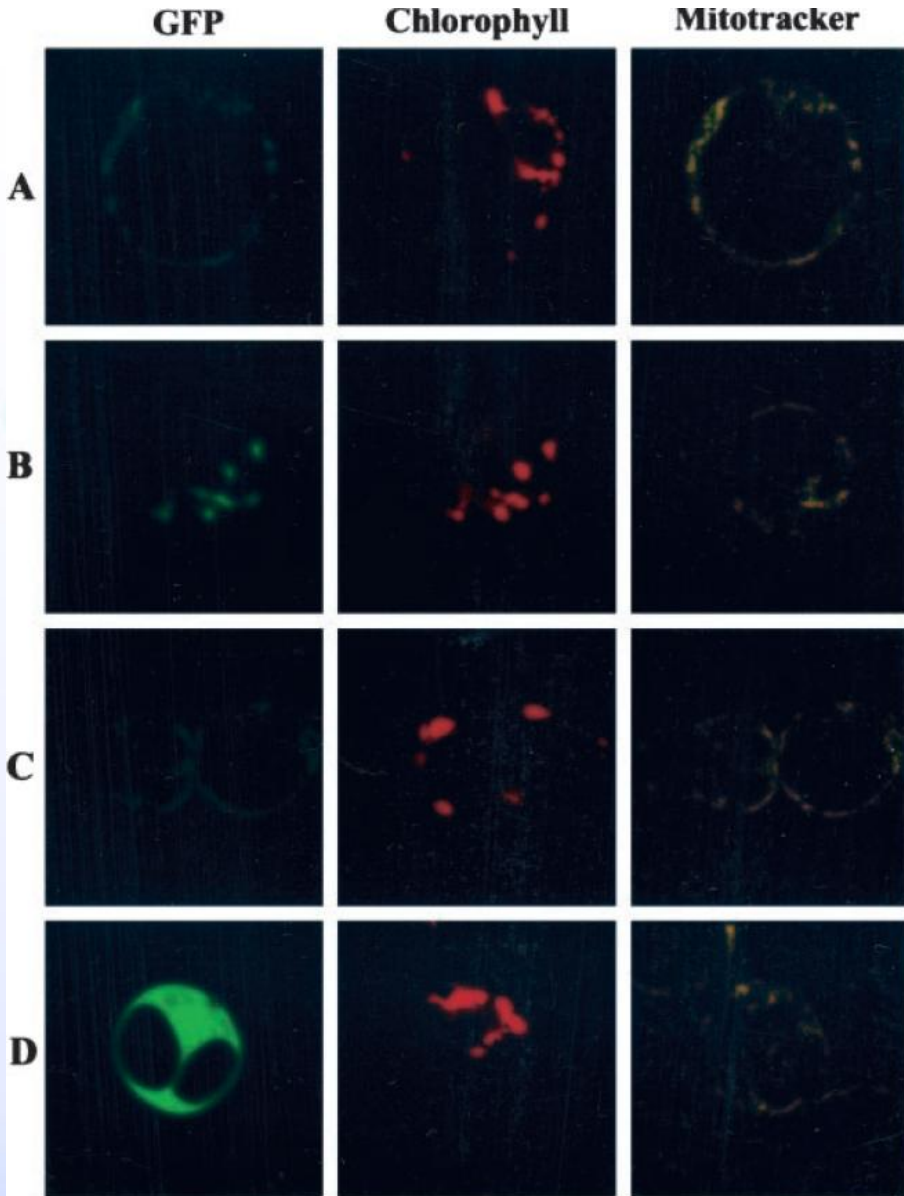
主要内容

- 背景知识
- 序列比对
- 构建进化树
- 预测三维结构
- 预测信号肽



使用signalP预测的结果





<i>Name</i>	<i>Location</i>
<i>DFA</i>	<i>Mitochondria</i>
<i>DFB</i>	<i>chloroplast</i>
<i>DFC</i>	<i>Mitochondria</i>
<i>DFD</i>	<i>cytosol</i>



- 谢谢罗老师的指导
- 谢谢队友们的工作
- 谢谢同学们认真听取我组的报告