

Überlagerung von Liganden

Untersuchung der strukturellen
Eigenschaften der Polyspezifität des
FAB fragments CB4-1 (anti-p24
monoklonale Antikörper)

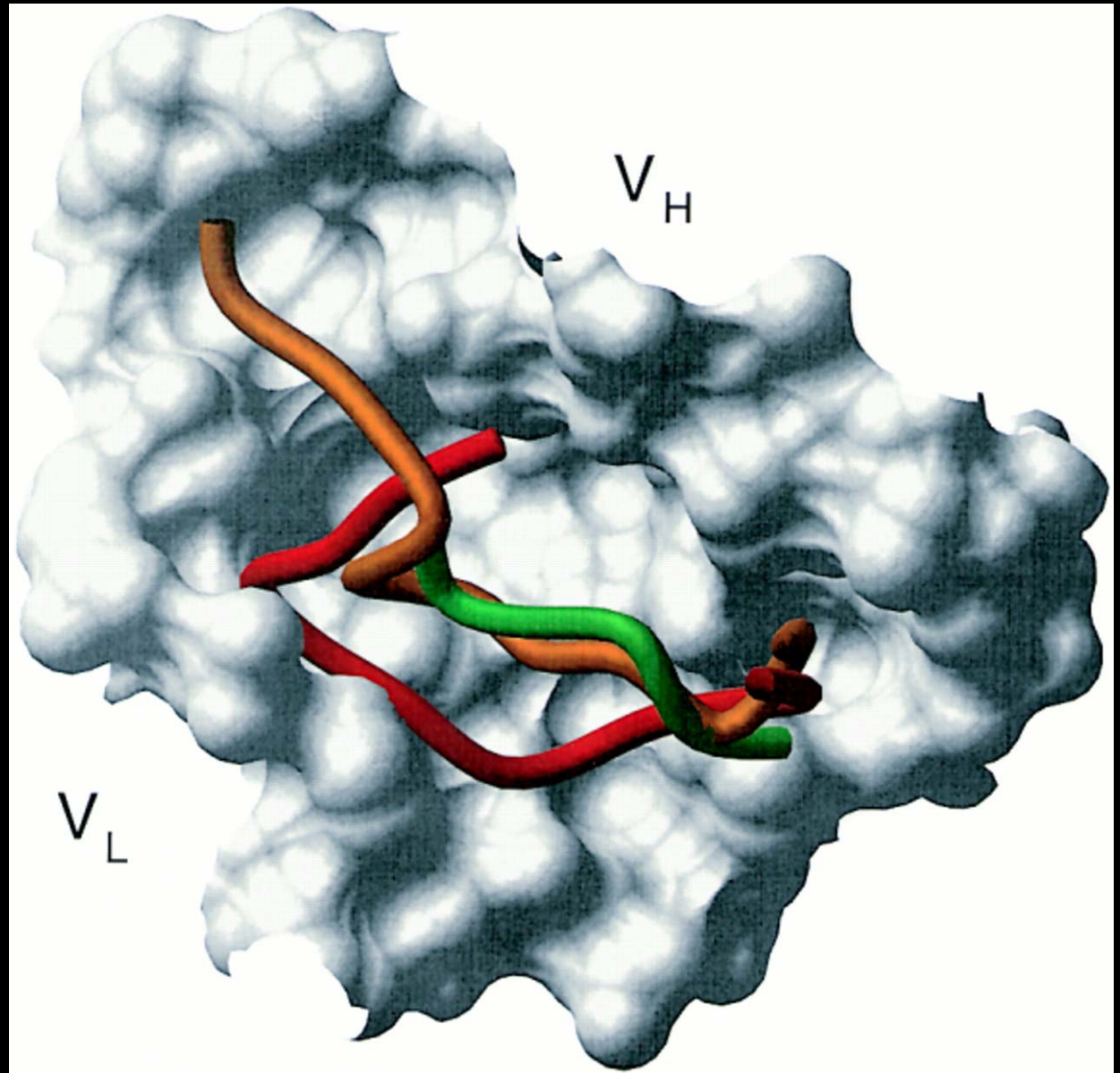
Sequenzen der Liganden

- 1BOG: GAEDLQKATPDLNQKL, Homolog eines Epitops der Maus: **ORI**
- 1CFN: GAQDLL*GATPDLNLT*, Epitop-ähnlich: **SIM**
- 1CFS: EWGGARIGLWRIT, Epitop-unähnlich: **DIF**
- 1CFT: kllkGpl, D-Peptid: **D-P**

L* ... Norleucin

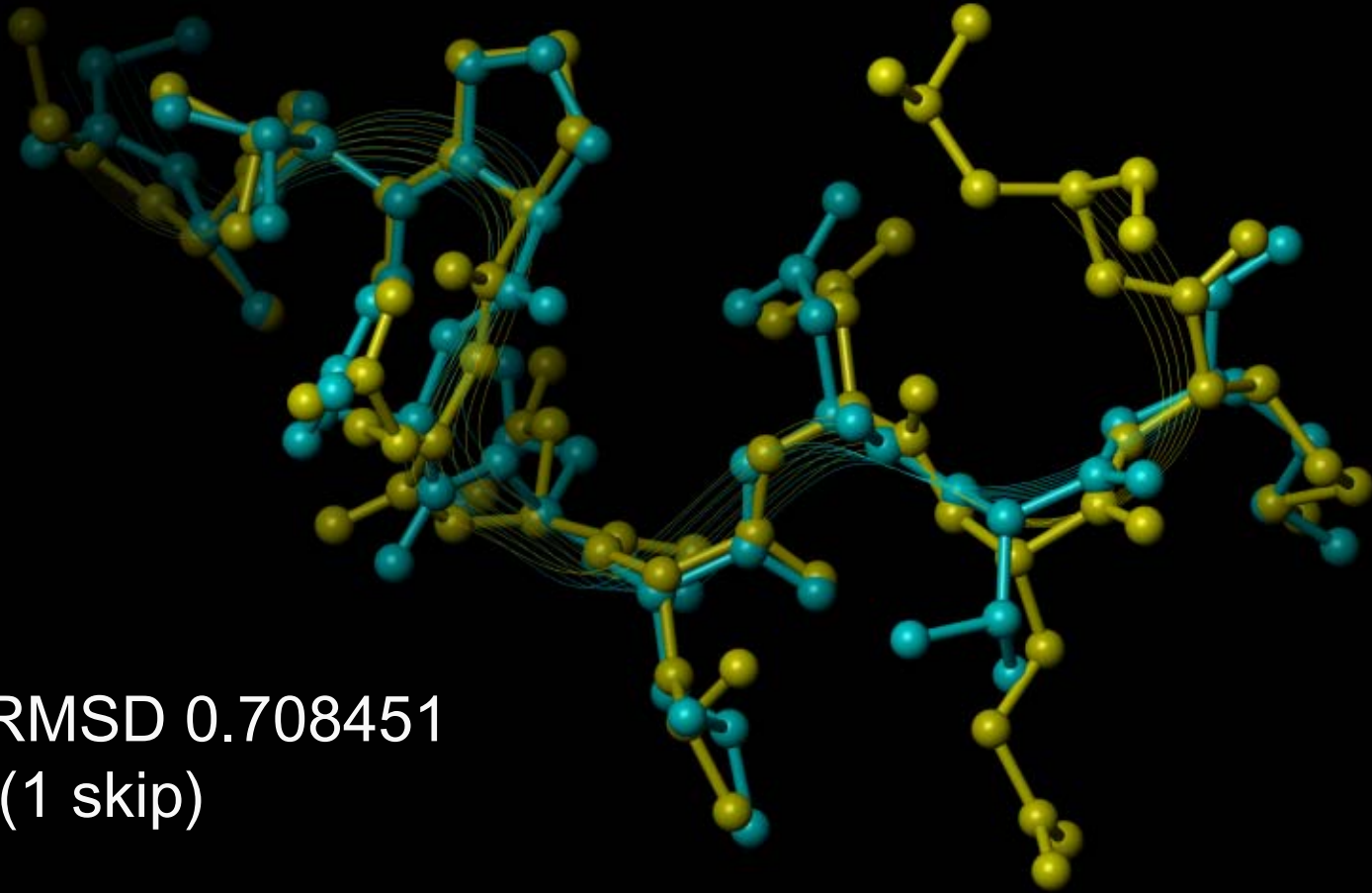
ORI
DIF
D-P

Kramer
et al.



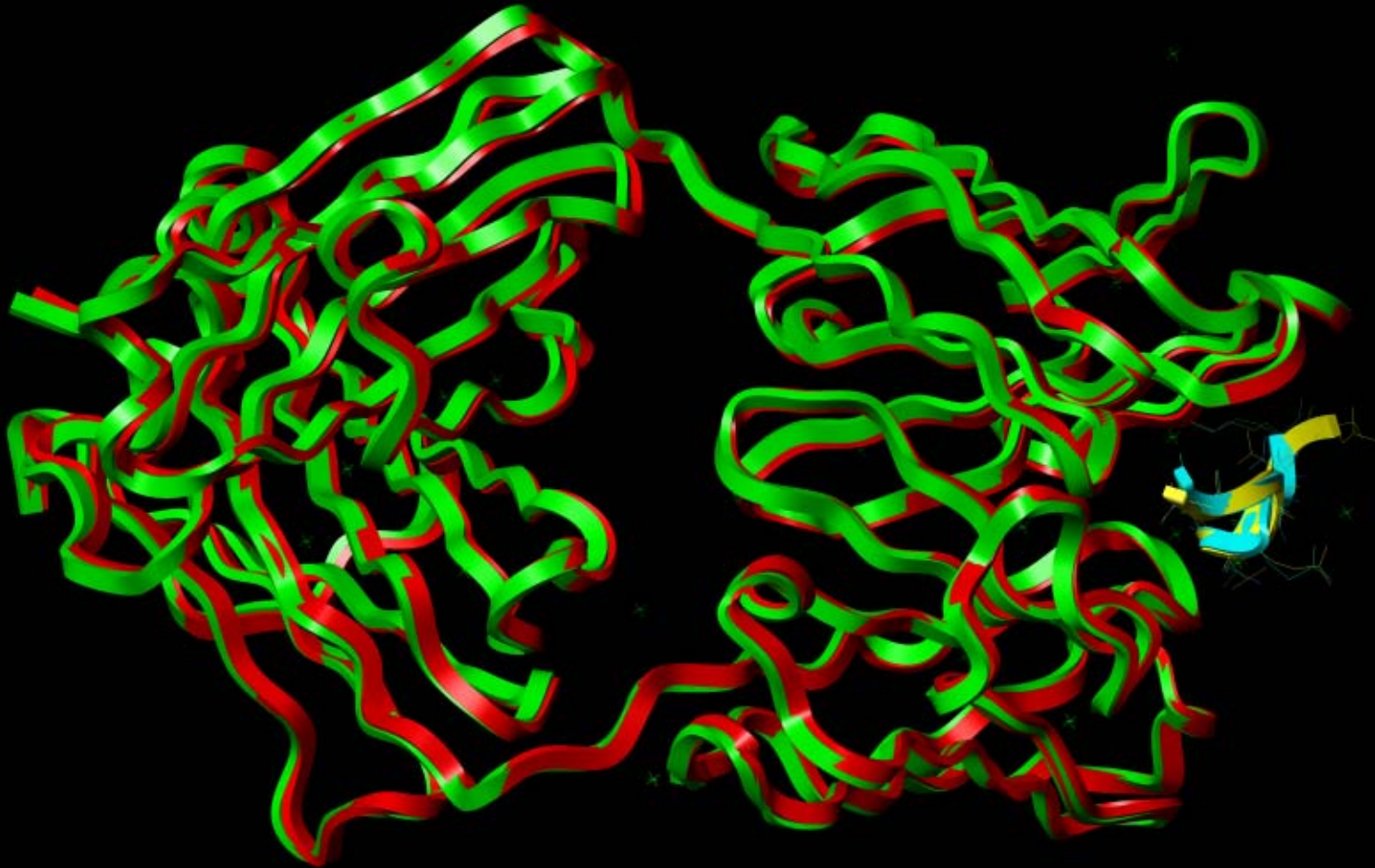
Frage: Liegen die Antikörper
übereinander, wenn die Liganden
überlagert werden?

ORI - SIM, Liganden



pRMSD 0.708451
(1 skip)

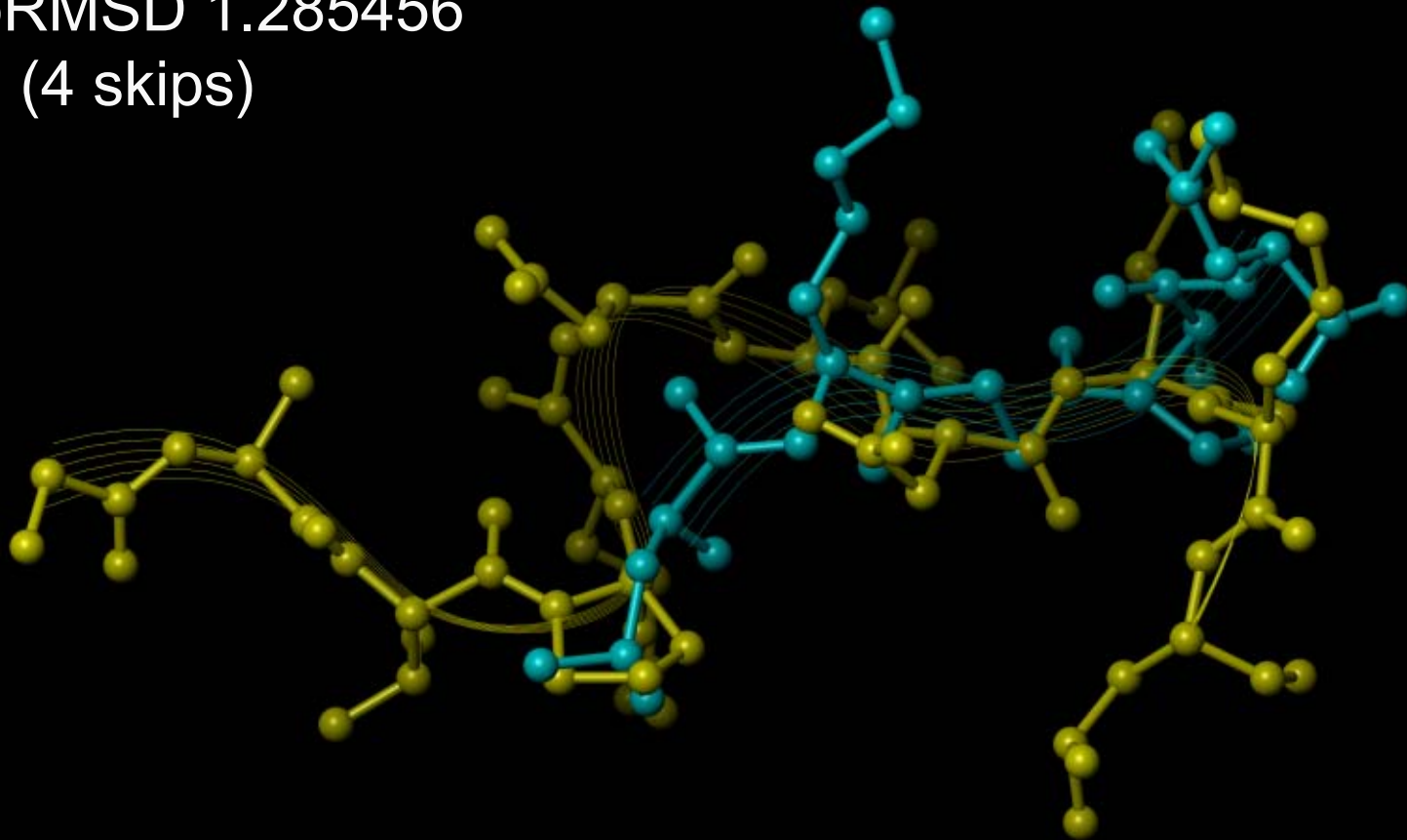
ORI - SIM



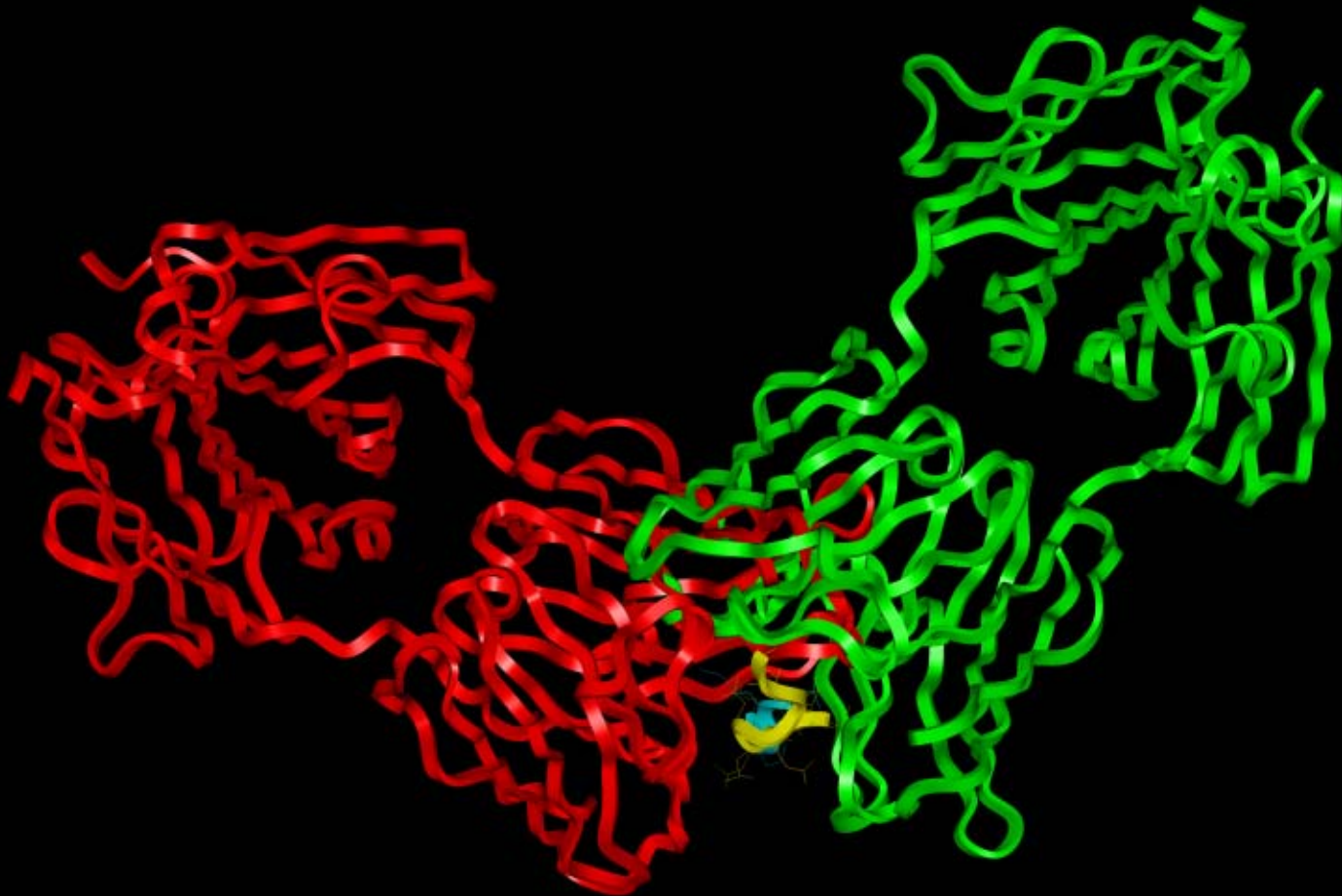
Antikörper perfekt überlagert!

ORI - D-P , Liganden

pRMSD 1.285456
(4 skips)

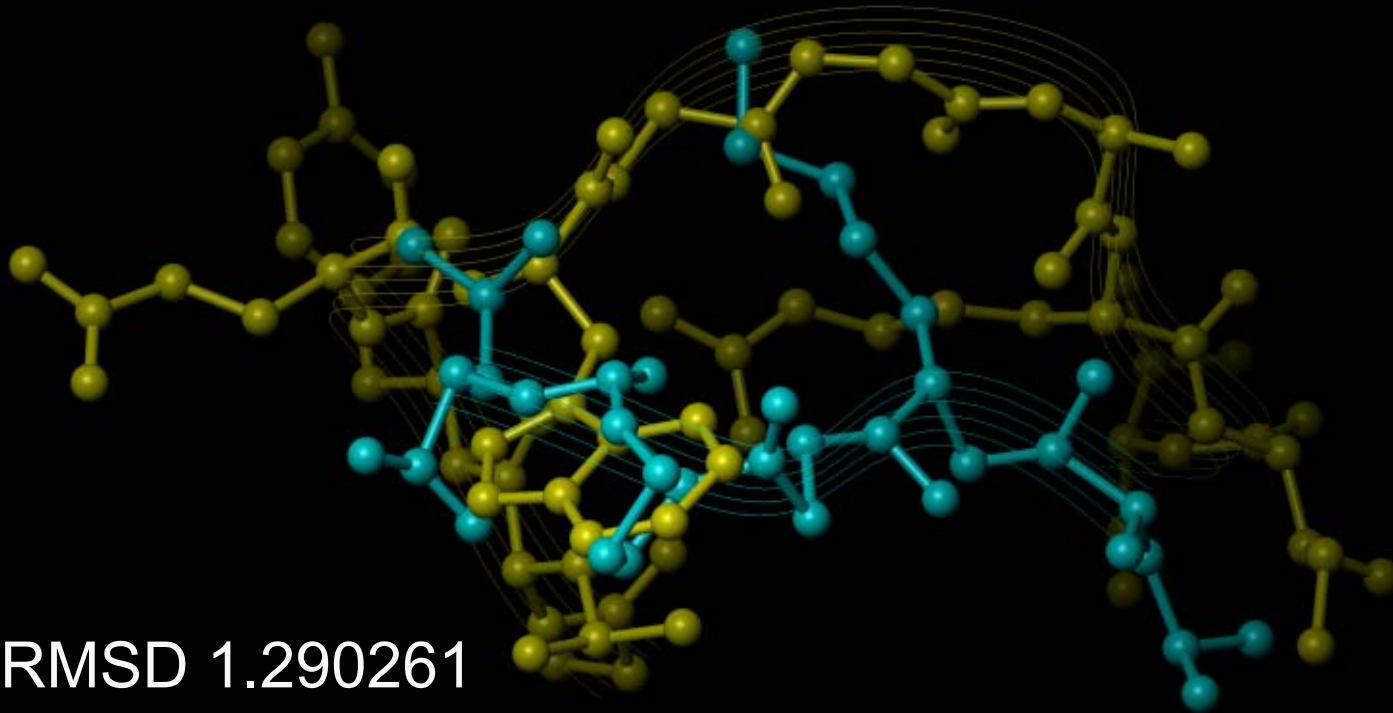


ORI - D-P



Antikörper an Ligandenachse
ca. 120° gedreht!

DIF - D-P , Liganden



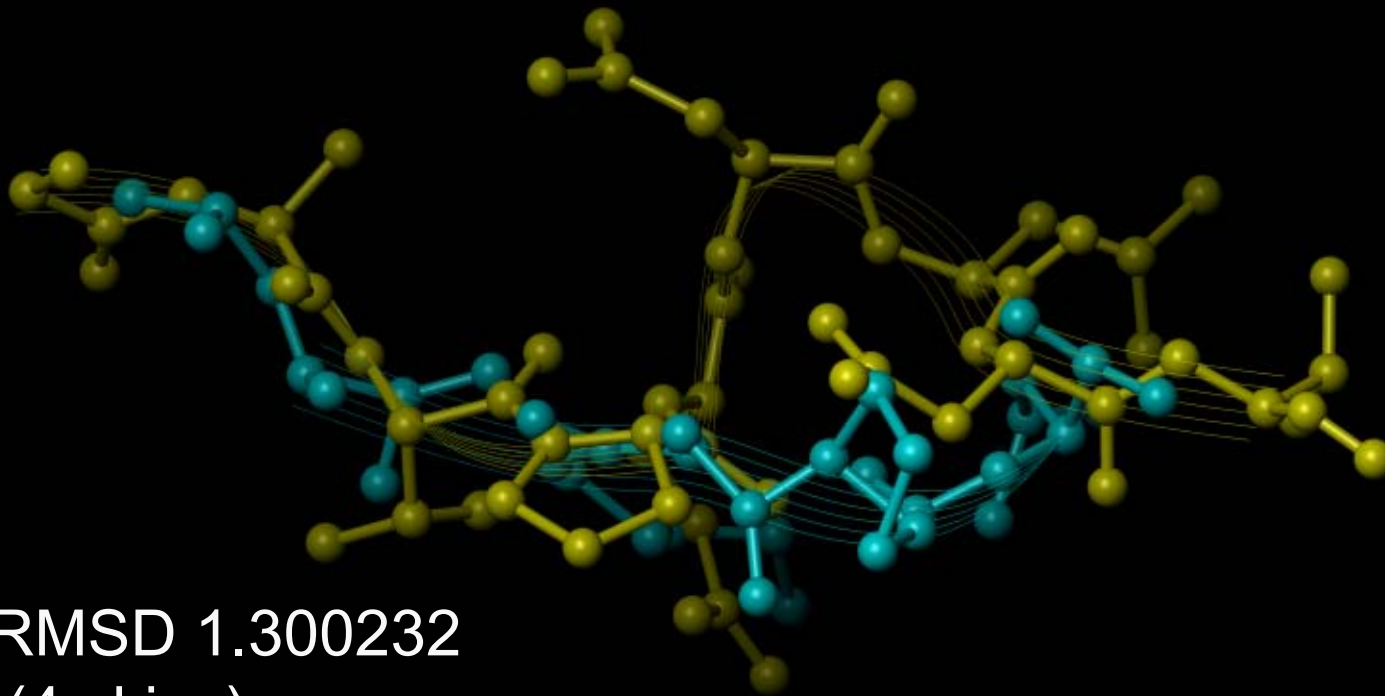
pRMSD 1.290261
(4 skips)

DIF - D-P



Antikörper gegenüberliegend
und gedreht!

SIM - D-P , Liganden



pRMSD 1.300232
(4 skips)

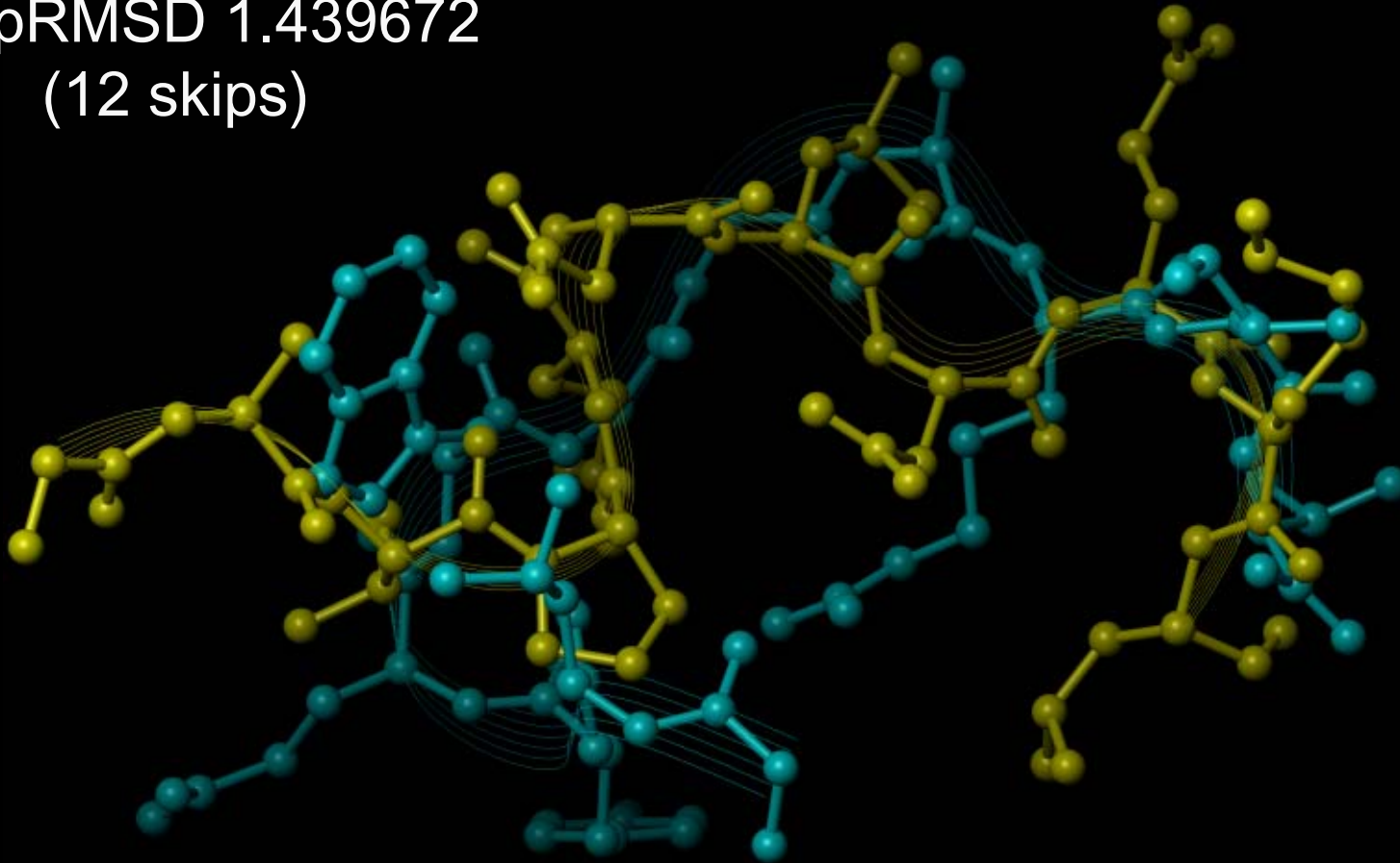
SIM - D-P



Antikörper übereinander, aber 180° gedreht!

ORI - DIF, Liganden

pRMSD 1.439672
(12 skips)



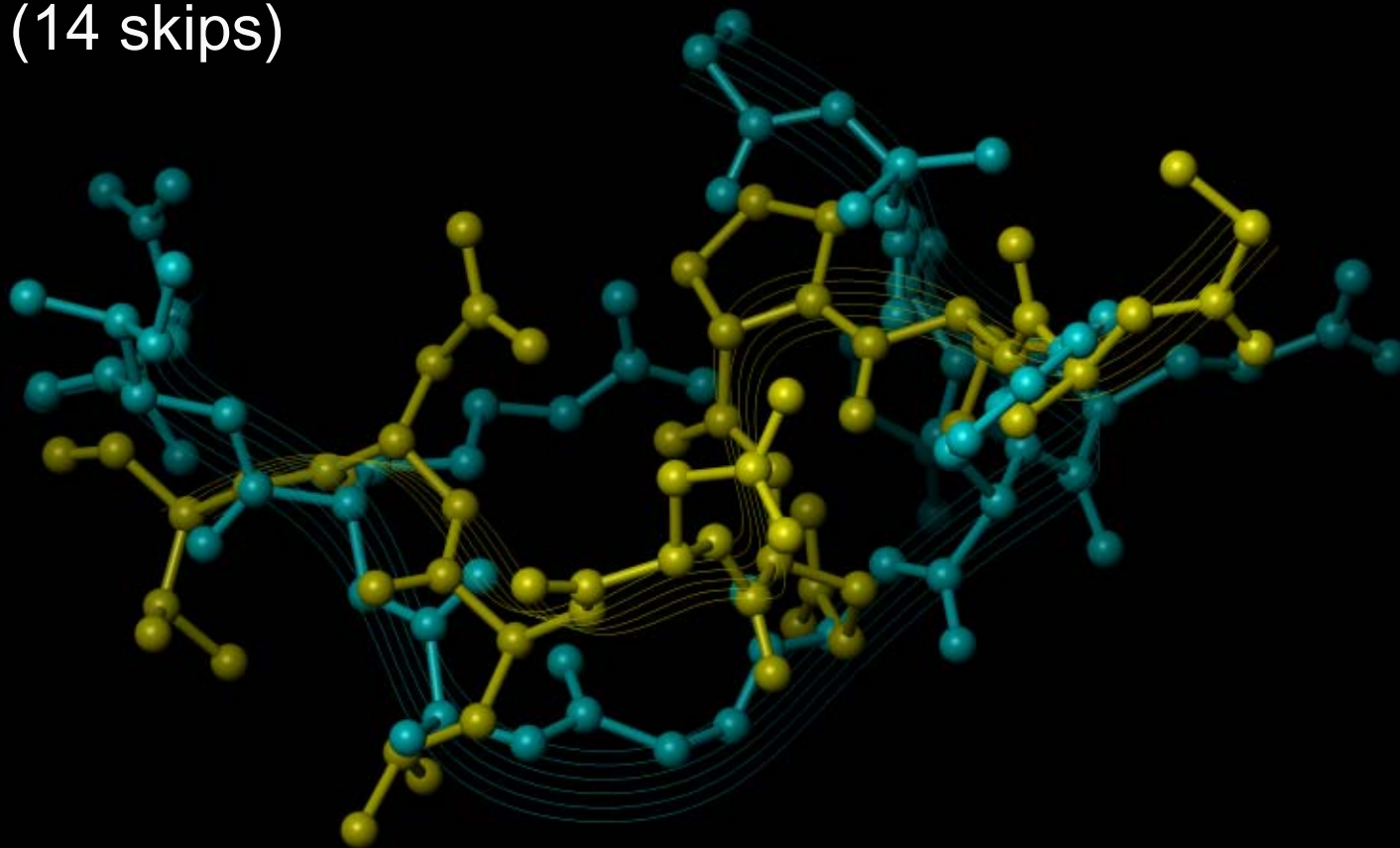
ORI - DIF



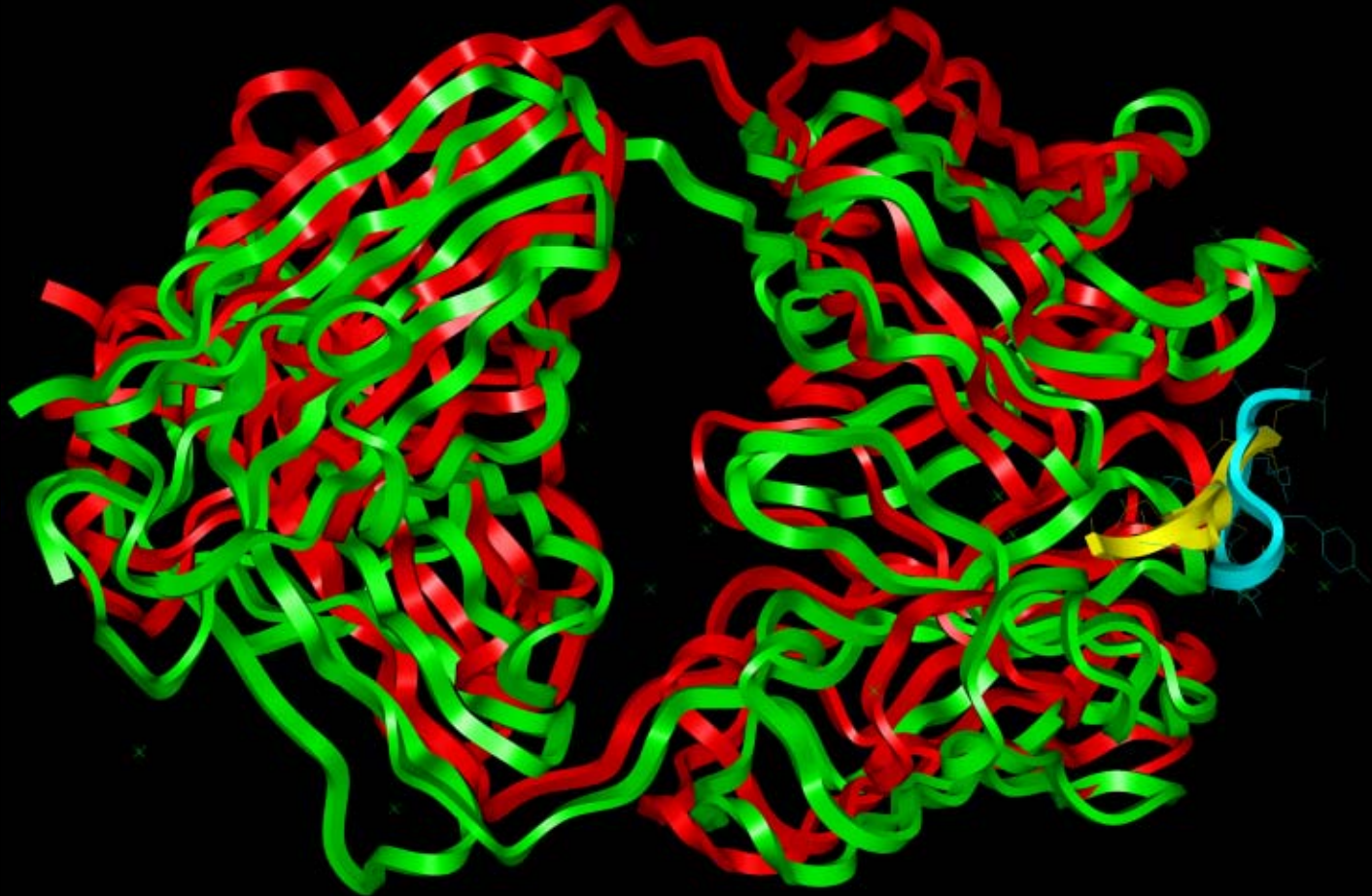
Antikörper übereinander, verschoben!

SIM - DIF , Liganden

pRMSD 1.483862
(14 skips)



SIM - DIF



Antikörper übereinander, nur leicht verschoben!

Zusammenfassung:

- ORI – SIM erwartungsgemäß gut
- D-P – ORI, SIM, DIF erwartungsgemäß schlecht
- DIF – ORI, SIM überraschend gut