

Strukturelle Bioinformatik (Masterstudiengänge Bioinformatik/Biochemie):

Übungsaufgaben zum Vorlesungsteil P. Güntert

1. Proteinkristallographie.

- Geben Sie die 4 experimentellen und rechnerischen Hauptschritte einer Proteinkristallstrukturbestimmung an. Welcher dieser Schritte ist im Allgemeinen der unvorhersehbarste?
- Welches sind die wichtigsten 4 Schritte der kristallographischen Datenauswertung?

2. Proteinkristallographie.

- Welche Größen definieren die Einheitszelle eines Kristalls?
- Welche primitiven 3-dimensionalen Gittertypen gibt es? Wie werden sie charakterisiert?
- Warum besteht das Beugungsmuster eines Kristalls aus einzelnen Punkten und nicht aus einer kontinuierlichen Verteilung?

3. Proteinkristallographie.

- Was ist ein Strukturfaktor?
- Welche Größe wird in einem Röntgenbeugungsmuster gemessen?
- Wie hängen Strukturfaktoren und Elektronendichte mathematisch zusammen (Formel!)?

4. NMR Spektroskopie.

- Was wird in einem NMR Experiment gemessen?
- Wie kommt man von einem zeitabhängigen Signal auf das Spektrum?
- Was versteht man unter „through-bond“ und „through-space“ NMR Experimenten?

5. NMR Spektroskopie.

- Wie kommt ein mehrdimensionales (2D, 3D) NMR Spektrum zustande?
- Was ist ein Kern-Overhauserereffekt (NOE)?
- Wie hängt die Intensität eines NOESY Kreuzsignals mit der entsprechenden interatomaren Distanz zusammen?

6. NMR Spektroskopie.

- Was sind die wichtigsten Eingabedaten für eine NMR Strukturberechnung?
- Was ist eine mehrdeutige Distanzeinschränkung (ambiguous distance restraint)?
- Wie lautet eine typische Zielfunktion, die während einer NMR Strukturberechnung minimiert wird?
- Was ist „simulated annealing“ (in einer NMR Strukturberechnung)?
- Warum berechnet man im Allgemeinen mehrere Konformere anstatt einer Struktur?

7. Klassische Mechanik.

- Wie ist die Lagrange-Funktion eines 1-dimensionalen klassischen mechanischen Systems mit dem Potenzial $V(x)$ definiert?
- Wie lauten die Lagrange-Bewegungsgleichungen der klassischen Mechanik?
- Zeigen Sie, dass die Lagrange-Bewegungsgleichungen den Newtonschen Bewegungsgleichungen äquivalent sind, wenn man das System mit kartesischen Koordinaten beschreibt.

8. Klassische Mechanik.

- a) Ein mechanisches System sei invariant gegenüber Verschiebungen entlang der x -Achse und Drehungen um die z -Achse. Welche Erhaltungsgröße hat es?
- b) Ein eindimensionaler harmonischer Oszillator ist durch das Potenzial $V(x) = k x^2$ charakterisiert. Welche Erhaltungsgrößen hat er?

9. Klassische Mechanik.

- a) Wie lautet die allgemeine Lösung der klassischen mechanischen Bewegungsgleichungen für einen eindimensionalen harmonischen Oszillator mit dem Potenzial $V(x) = k x^2$?
- b) Wie lautet die spezielle Lösung, die zur Zeit $t = 0$ den Anfangsbedingungen $x(0) = a$ und $\dot{x}(0) = 0$ genügt?
- c) Wie groß ist die Gesamtenergie des System aus b)?

10. Moleküldynamiksimulation.

- a) In einem Protein mit N Atomen gebe es N_{bond} kovalente Bindungen und N_{nb} nichtbindende Paarwechselwirkungen? Wieviele kovalente Bindungen bzw. nichtbindende Paarwechselwirkungen gibt es in einem 3 mal größeren Protein mit $3N$ Atomen?
- b) Wieviele nichtbindende Wechselwirkungen gibt es etwa in einem Protein mit 1000 Atomen?
- c) Wie kann der Rechenaufwand für nichtbindende Wechselwirkungen reduziert werden? Zeigen Sie die einzelnen Schritte.

11. Moleküldynamiksimulation.

- a) Wie lautet die Taylor Reihenentwicklung der Funktion $f(x) = \cos(2x)$ um die Stelle $x_0 = \pi$. Geben Sie die Formel bis zu Größen der Ordnung $O(x^2)$ an.
- b) Wie funktioniert der Verlet Algorithmus zur numerischen Integration der Bewegungsgleichungen? Wie berechnen sich die Positionen $\vec{r}(t + \Delta t)$ aus den Grössen zu früheren Zeiten?
- c) Wie können beim Verlet-Algorithmus die Geschwindigkeiten berechnet werden?