



2. Übungsblatt - Molekulare Maschinen

für die Vorlesung

Einführung in die Bioinformatik

Elektronische Abgabe an: joachim.fritscher@student.uni-tuebingen.de

Aufgabe 1 Proteinkristallographie

(a) Das Verfahren der Proteinkristallographie haben Sie in der Vorlesung kennen gelernt. Welche Grundvoraussetzung muss erfüllt sein, damit Sie mit diesem Verfahren ein dreidimensionales Bild des von Ihnen untersuchten Proteins erzeugen können? Was sind demnach Ihrer Meinung nach die Vor- und Nachteile dieser Methode?

(b) Suchen Sie in der Protein Data Bank (PDB, www.pdb.org) nach dem Protein mit der PDB-ID 1RT1. Schauen Sie sich dieses Protein weiterhin auch einmal mit einem Viewer Ihrer Wahl an (BALLView, jmol, pymol, etc.).

- Um welches Protein handelt es sich hierbei?
- Aus wie vielen Ketten besteht dieses Protein insgesamt? Wie viele *unterschiedliche* Aminosäureketten gibt es und was enthalten die restlichen Ketten?
- Was enthält die Struktur hingegen *nicht*, was jedoch eigentlich Teil einer kompletten chemischen Darstellung ist, und daher z.B. vor der Durchführung einer MD-Simulation hinzugefügt werden müsste?

Aufgabe 2 Molekulardynamik Simulationen

Beschreiben Sie kurz das Verfahren der Molekulardynamik Simulation.

- Was brauchen Sie als input um eine Molekulardynamik Simulation durchführen zu können?
- Wie/woraus wird in jedem Zeitschritt prinzipiell die Veränderung der Atomkoordinaten berechnet?
- Nennen Sie verschiedene Anwendungsbeispiele für MD-Simulationen; d.h. was könnte man mit Hilfe dieser Methode herausfinden wollen?

Aufgabe 3 Komplexität von MD-Simulationen

Sie wollen eine MD-Simulation eines (relativ kleinen) Proteins durchführen. Insgesamt möchten Sie 20ns mit einem Zeitschritt von 0.002ps simulieren.

Wie lange würde diese Simulation dauern wenn Sie davon ausgehen, dass ca. 0.5s pro update des Kraftfeldes (und damit pro simuliertem Zeitschritt) benötigt werden?

Warum kann man, um das Ganze zu beschleunigen, den Zeitschritt nicht einfach auf einen viel höheren Wert, z.B. 0.1 ns, setzen?