

### Übung 3

- 1) Berechnen Sie, unter Zuhilfenahme des Nächste-Nachbarn-Modells, die Gibbs-Energie zwischen einer einzelsträngigen DNA 5'-GGACT-3' und ihrer komplementären Sequenz bei 37 °C. Recherchieren Sie dafür die Energien zwischen benachbarten Basen (NN Energien).
- 2) Definieren Sie die Schmelztemperatur in Bezug auf DNA. Wie kann diese bestimmt werden? Welche Parameter können die Schmelztemperatur von DNA verändern?
- 3) Eine gefaltete Ribonuklease Struktur ist bei  $\Delta G = -7,1 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$  bei  $T = 25 \text{ °C}$  stabil.
  - a. Wie ist das Verhältnis von gefalteten zu denaturierten Molekülen bei  $T = 25 \text{ °C}$ ?
  - b. Die Enthalpie des Faltungsprozess bei  $T = 25 \text{ °C}$  liegt bei  $238,6 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$ . Nehmen Sie an, dass sich die Enthalpie und Entropie nicht ändern wenn die Temperatur auf  $T = 37 \text{ °C}$  ansteigt. Bestimmen Sie  $\Delta G$  bei  $T = 37 \text{ °C}$ .
  - c. Wie ist das Verhältnis von gefalteten zu denaturierten Molekülen bei  $T = 37 \text{ °C}$ ?
- 4) Für die Bildung einer doppelsträngigen DNA aus zwei komplementären Einzelsträngen A und B sei  $\Delta H^\circ = -177,2 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$  und  $T_m = 311 \text{ K}$ . Die Startkonzentration der Einzelstränge A und B sei  $C_A = C_B = 10^{-4} \text{ M}$ . Bestimmen Sie die Gleichgewichtskonstante bei  $T_m$ . Nutzen Sie diese um die Gleichgewichtskonstante bei Bildung einer doppelsträngigen DNA bei  $T = 335 \text{ K}$  zu bestimmen (Nehmen Sie an, dass  $\Delta H$  und  $\Delta S$  bei  $T = 311 \text{ K}$  und  $T = 335 \text{ K}$  gleich sind). Bestimmen Sie mit dem ermittelten Wert die Änderung der Gibbs-Energie bei  $T = 335 \text{ K}$ .
- 5) In einem Modell zum Auftrennen einer doppelsträngigen DNA werden  $N$  Verknüpfungen zwischen den Einzelsträngen angenommen; jede Verknüpfung hat zwei Zustände, einen geschlossen (Energie 0) und einen offenen (Energie  $\epsilon$ ). Wir nehmen an, dass die DNA ausschließlich beginnend von dem linken Ende aufgetrennt werden kann und die Verknüpfung  $s$  nur geöffnet werden kann, wenn alle Verknüpfungen links von  $s$  (1, 2, ...,  $s - 1$ ) bereits geöffnet sind.

- a. Zeigen Sie dass die Funktion zur Auftrennung geschrieben werden kann als:

$$Z = \frac{1 - \exp\left[-\frac{(N+1)\epsilon}{k_B T}\right]}{1 - \exp\left[-\frac{\epsilon}{k_B T}\right]}$$

- b. Finden Sie die durchschnittliche Anzahl geöffneter Verknüpfungen innerhalb der Grenze  $\epsilon \gg k_B T$ .