

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 ΔG 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 ΔH und ΔS 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 ϵ). 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 $\epsilon \gg k_B T$.