



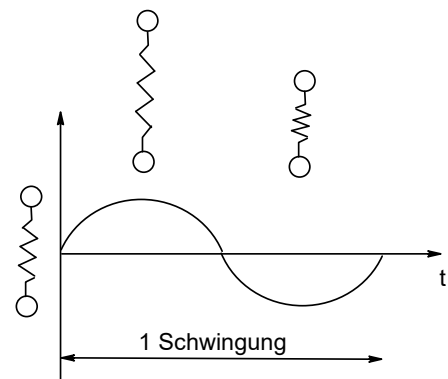
**Übungsblatt 5** Abgabe bis 05.06.23 vor der Übung

**Vorname, Name:**

1. In MD-Simulationen ist die Größe des Zeitschritts limiert durch die hochfrequenten Bindungsschwingungen von N-H und O-H die bei einer Wellenzahl von etwa  $3500\text{ cm}^{-1}$  liegen.
- a) Rechnen Sie die Wellenzahl in die entsprechende Frequenz  $\nu$  (in  $\text{s}^{-1}$ ) um. (10 Punkte)

$$\text{Wellenzahl} = \frac{\nu}{c} \quad \text{mit der Lichtgeschw. } c = 2.998 \cdot 10^{10} \text{ cm s}^{-1}$$

- b) Wie lange dauert dann eine vollständige Schwingung (in s)? (15 Punkte)



- c) Ein typischer MD-Zeitschritt beträgt  $5 \cdot 10^{-16} \text{ s}$  (= 0.5 fs). Wieviele Zeitschritte vergehen während einer vollständigen Schwingung, bzw. wieviele *samples* hat man pro Schwingung? (15 Punkte)
- d) Welche Maßnahmen ergreift man, um die Größe des Zeitschrittes in MD-Simulationen heraufsetzen zu können? (Nennen Sie zwei) (8 Punkte)

e) Berechnen Sie die entsprechende Frequenz  $\nu$  (in  $\text{s}^{-1}$ ) für die  $\text{C}\equiv\text{N}$  Bindungsschwingung, die eine Wellenzahl von etwa  $2230 \text{ cm}^{-1}$  hat. (10 Punkte)

f) Wie oft wird die Amplitude der  $\text{C}\equiv\text{N}$  Bindungsschwingung erfasst (vgl. Aufgabenteil c) (15 Punkte)

g) Wie hoch darf die Frequenz  $\nu$  (in  $\text{s}^{-1}$ ) einer Schwingung sein, damit ihre Amplitude während des MD-Zeitschritts gerade noch zweimal erfasst wird (Nyquist Frequenz)? Geben Sie auch die Wellenzahl dieser Schwingung an. (15 Punkte)

2. Sie haben eine MD-Simulation für ein Protein in einer Wasserbox über eine Zeitspanne von 100 ps für ein Protein durchgeführt. Welche der folgenden Analysen können Sie durchführen?

Bitte ankreuzen.  $100 \text{ ps} = 1 \cdot 10^{-10} \text{ sec}$

(12 Punkte)

Ja

Nein

Die Bewegung der Seitenketten beschreiben.

Die Bewegung der Loops beschreiben.

Die Entfaltung des Proteins beschreiben.

Die Bewegung einzelner Domänen gegeneinander beschreiben.

Den Ordnungsgrad der Wassermoleküle um das Protein beschreiben.

Die Umorientierung von Wasserstoffbrücken beschreiben.