

### Задача 2\_1.

Аминокислоты бывают «левыми» и «правыми». Бывает ли «левая» и «правая» вода? А этиловый спирт  $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{OH}$ ? Почему?

### Задача 2\_2.

Тепловые, имеющие энергию  $kT$  колебания имеют частоту  $\nu_T \approx 7 \times 10^{12} \text{ с}^{-1}$  при  $27^\circ\text{C}$ . Какова частота тепловых колебаний при  $-200^\circ\text{C}$ ? При  $+2700^\circ\text{C}$ ?

### Задача 2\_8.

Оценить квантовую неопределенность координаты частицы, испытывающей тепловые колебания. Молекулярный вес частицы: (а) – 1 дальтон; (б) – 18 дальтон (молекула воды); (в) – 100 дальтон (аминокислотный остаток).

### Задача 3\_2.

От каких электронов атома, внешних или внутренних, зависит Ван-дер-Ваальсово взаимодействие?

### Задача 3\_5.

Вспомните карты разрешенных состояний для L-аланина и глицина.

Как выглядят карты разрешенных состояний для D-стереоизомеров тех же аминокислот?

### Задача 5\_3.

Каково характерное расстояние между ионами  $\text{H}^+$  (точнее,  $\text{H}_3\text{O}^+$ ) при  $\text{pH}7$ ? при  $\text{pH}0$ ?

### Задача 6\_5.

Известно, что повышенная (по сравнению с вакуумом) диэлектрическая проницаемость среды создается ориентирующимися по электрическому полю диполями — молекулами этой среды. Известно также, что диэлектрическая проницаемость  $\varepsilon > 1$  ослабляет создаваемый зарядом потенциал согласно формуле  $\varphi = q/\varepsilon r$ , где  $r$  – расстояние от заряда  $q$  до точки, где этот потенциал измеряется.

Предположим, что «среда» состоит из одного-единственного диполя, расположенного на полпути между зарядом  $q$  и точкой А, где измеряется потенциал поля (и что этот диполь, естественно, сориентирован по полю заряда  $q$ ; см. схему 6\_5).

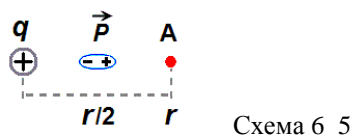


Схема 6\_5

Усилит или ослабит этот диполь тот потенциал, что был в точке А в отсутствие диполя?

### Задача 8\_7.

Во сколько раз замедляет процесс наличие на его пути энергетического барьера высотой в 10 ккал/моль при  $0^\circ\text{C}$ ? при  $50^\circ\text{C}$ ? при  $100^\circ\text{C}$ ?

### Задача 9\_1.

Какова константа равновесия  $K$  (спираль/клубок) между спиральным и клубковым состоянием цепи в куске из  $n = 23$  звеньев, если фактор элонгации спирали  $s = 1.1$ , фактор инициации спирали  $\sigma = 0.001$ , а рассматриваемый кусок окружен в своей цепи:

- клубковыми участками и с N-, и с С-конца;
- клубковым участком с N-, и спиральным участком с С-конца;
- спиральным участком с N-, и клубковым участком с С-конца;
- спиральными участками и с N-, и с С-конца.

Для случая (а) оценить также минимальную длину стабильной спирали, положение концов которой в полипептидной цепи не флуктуирует.

### Задача 9\_5.

Вклад аминокислотного остатка в контурную длину цепи составляет около  $3.5\text{Å}$ , а длина Куновского сегмента (т.е. расстояние, на котором цепь «помнит» свое направление) —  $35\text{Å}$ . Каково расстояние между концами клубкообразной цепи (т.е., примерно, диаметр клубка) из 150 аминокислотных остатков?

### Задача 10\_1.

Средний молекулярный вес аминокислотного остатка — 110 дальтон.

- Оценить средний объем аминокислотного остатка, считая, что плотность белка равна  $1.3 \text{ г/см}^3$ .
- Каков диаметр глобулы из 150 аминокислотных остатков?

### Задача 10\_2.

Оценить соотношение концентраций (в моль/литр) ионов  $H^+$  при pH7 и заряженных аминокислотных остатков в растворе, в котором, как в клетке, белок составляет ~10% по весу.

### Задача 11\_1.

Какая из нижеприведенных последовательностей может кодировать фибриллу из перевитых  $\alpha$ -спиралей, какая – фибриллу коллагена, какая –  $\beta$ -структурный фибриллярный белок:

- (a) -Gly-Ala-Gly-Thr-Gly-Ala-Gly-Thr-Gly-Ala-
- (б) -Gly-Ala-Pro-Gly-Pro-Pro-Gly-Thr-Pro-Gly-Ala-Pro-Gly-Pro-Pro-
- (в) -Gly-Ala-Glu-Ser-Leu-Gly-Asn-Gly-Ala-Glu-Ser-Leu-Gly-Asn-Gly-Ala -

### Задача 12\_1.

- (а) Почему типичный спиральный белок выглядит либо как пучок  $\alpha$ -спиралей, идущий от одного края мембраны до другого, либо как  $\beta$ - цилиндр, также идущий от одного края мембраны до другого?
- (б) Может ли внутри мембраны лежать не  $\beta$ -цилиндр, а  $\beta$ -лист?

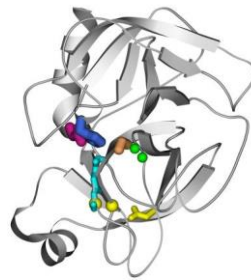
### Задача 12\_2.

Может ли внутри мембранного белка, в самой середине его пространственной структуры, лежать большой нерегулярный участок?

### Задача 12\_5.

Предположим, электрон, совершающий  $10^{15}$  колебаний в секунду, проникает через барьер шириной  $L$  за 0.001 секунды. За какое время он проникнет через вдвое более широкий барьер той же высоты?

### Задача 13\_2.



Разделить домены в белке, показанном на Схеме 13\_2.

Схема 13\_2

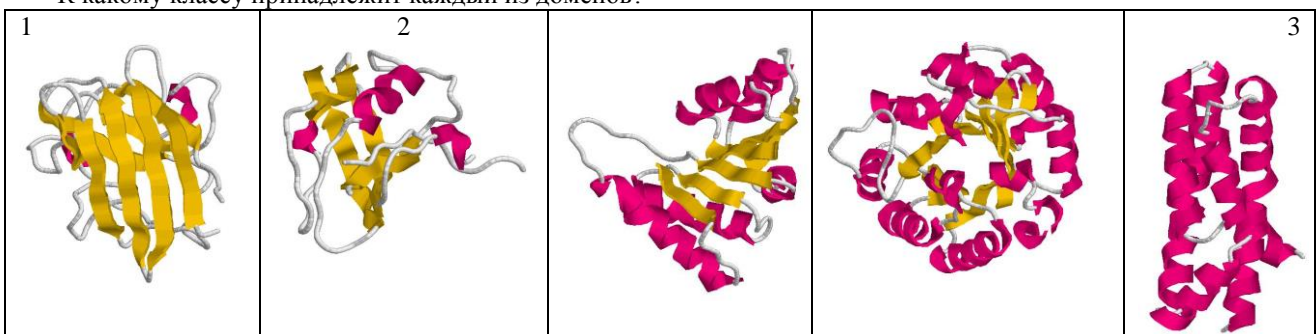
### Задача 14\_1.

Последовательность участков вторичной структуры ( $\alpha$  и  $\beta$ ) выглядит как в  $\beta\alpha\beta\alpha\beta\alpha\beta\alpha\beta$  в одном домене, и как  $\beta\beta\beta\alpha\beta\beta\alpha\alpha\alpha$  — в другом. Какой из них принадлежит к классу  $\alpha/\beta$  белков, а какой — к классу  $\alpha+\beta$  белков?

### Задача 15\_1.

Изображенные на Схеме белковые домены принадлежат к четырем главным для водорастворимых глобулярных белков классам ( $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\alpha/\beta$ ,  $\alpha+\beta$ ).

К какому классу принадлежит каждый из доменов?



### Задача 16\_2.

В плавающих в воде олигопептидах пролин постоянно переходит из *cis*-формы в *trans*- и обратно. Переход происходит в секундном диапазоне времен, а экспериментально измеренное соотношение *cis*- и *trans*- форм составляет 1:10. В белковых глобулах перехода из *cis*-формы в *trans*- (и из *trans*- в *cis*-) не наблюдается: здесь *cis*-пролины занимают одни положения в цепи белка, а *trans*-пролины — другие. Оцените, какое соотношение между *cis*- и *trans*- формами пролина должно наблюдаться в белковых глобулах?

#### Задача 17\_4.

Белок плавится (по типу «все-или-ничего») при температуре  $T^* = 350$  К, причем ширина области плавления  $\Delta T = 7^\circ$ .

(а) Какова разность энтальпий  $\Delta H$  нативного и денатурированного состояний белка в точке плавления? Какова разность энтропий  $\Delta S$  нативного и денатурированного состояний белка в точке плавления?

(б) Какова разность свободных энергий  $\Delta G$  нативного и денатурированного состояний белка при температуре плавления  $T^*$ ?

#### Задача 18\_1.

Опыты по денатурации единичных белковых молекул делаются так. Один конец молекулы химически пришивается к подложке, другой — к щупу атомного силового микроскопа, и к этому щупу прикладывается некая сила, разворачивающая белок.

Оценить силу, необходимую для разворачивания белка из 100 аминокислотных остатков, стабильность нативного состояния которого, по сравнению с клубком, составляет 10 ккал/моль, если время наблюдения не ограничено.

#### Задача 18\_2.

Вопрос о том, какое число сортов звеньев дает возможность цепи однозначно определять пространственную структуру, можно переформулировать в виде следующей задачи:

Предположим, что цепь из  $N$  звеньев имеет  $M$  укладок, одинаковых по такому свойству, как возможность быть оптимальной структурой для какой-то последовательности звеньев (что предполагает также одинаковость по этим укладкам по таким общим свойствам, как компактность, содержание вторичной структуры и т.д.).

Какое число сортов звеньев  $K$  может обеспечить существование у каждой последовательности звеньев только одной укладки с минимальной для этой последовательности энергией?

#### Задача 20\_1.

Предположим, что в некоем белке мутация одного аминокислотного остатка дала тот сдвиг шевронного графика мутанта относительно шевронного графика белка «дикого типа» (д.т.), что показан на Схеме 20\_1а, а мутация другого — тот, что показан на Схеме 20\_1б.

Что мы можем сказать о вовлеченности этих остатков в ядро сворачивания белка?

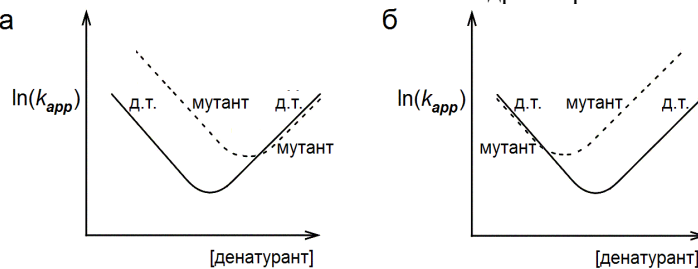


Схема 15-2

#### Задача 24\_4.

Предположим, что реакция самопроизвольного (некатализируемого) превращения субстрата в продукт происходит по механизму  $S \leftrightarrow S^* \rightarrow P$  (где  $S^*$  — переходное состояние субстрата), с активационной свободной энергией  $\Delta F_0^\ddagger$ , а реакция превращения субстрата в продукт на ферменте происходит по тому же механизму  $ES \leftrightarrow ES^* \rightarrow EP$ , но с более низкой (из-за взаимодействия переходного состояния субстрата с ферментом) активационной свободной энергией  $\Delta F_{cat}^\ddagger = \Delta F_0^\ddagger - \delta$ .

Как относится каталитическая константа скорости на ферменте к скорости самопроизвольного превращения субстрата в продукт?

$$k_3 = k_0 \cdot \exp(\delta/k_B T).$$

#### Задача 25\_2.

Константа диссоциации АТФ в воде,  $K_{diss} = \frac{[АДФ][Ф]}{[АТФ]_{eq}} = 5 \cdot 10^5$  моль/литр, где значком *eq* помечена та

концентрация АТФ, при которой он, при данных концентрациях АДФ и фосфата Ф, находится в равновесии с ними.

(а) Какова свободная энергия гидролиза одной молекула АТФ при физиологических концентрациях  $[АТФ]_\phi \approx 10^{-3}$  моль/литр,  $[АДФ]_\phi \approx 10^{-5}$  моль/литр,  $[Ф]_\phi \approx 10^{-3}$  моль/литр?

(б) При какой концентрации АТФ (и при всё тех же  $[АДФ]_\phi$  и  $[Ф]_\phi$ ) распад АТФ сменится его синтезом?