

Kapitel 6

Anhang

6.1 Die Proteinsets

Die verwendeten Proteine stammen aus der *protein data bank* (PDB) (<http://www.rcsb.org/pdb/>). Zu jeder Struktur gibt es einen Vierbuchstabencode. Großbuchstaben bzw. Zahlen hinter dem PDB Code geben die verwendete Kette eines mehrkettigen Proteins an. Die verschiedenen verwendeten Sets enthalten folgende Strukturen:

Set_{disk}:

1ihvA	1vie	1alo	1hkBA	1qba	1kit	3r1rA	1spuA	1fdi
1cgt	1tkaA	1goh	1reqB	1sqc	1sly	1aorA	1tf4A	1euu
1fuiA	1dlc	1ao6A	1b2nA	2kauC	1lxtA	1pnkB	2vaoA	1aozA
1aoqA	1mroA	1thg	1clc	1fssA	1frvB	1ar1A	1bfd	3minB
1jetA	1yveI	1mtyD	1mhyD	1dpe	1a4sA	1fgjA	2myr	1smd
1ecfA	1byb	1asyA	2dpg	1lam	1qnf	2cae	2pgd	1skyE
1kapP	3pbgA	1ax4A	1burA	3grs	3gcb	1bp1	1dfjI	1furA
1bu7A	1a8d	1pii	1elyA	1hrdA	1mroB	1otp	1pmi	1oneA
1csh	6cel	1adeA	1gnd	3gsaA	2bpa1	1rmg	1ysc	1uae
1ft1B	16pk	1iso	1ajsB	1phc	1chmA	1fedA	1inp	1oyc
1rom	1svb	1php	1pbe	1cl1A	1nscA	1cg2A	4xis	3mddA
1mtyB	1mhyB	1bd0A	1ofgA	1edg	1a9xB	3sil	1hpm	2nacA
3btoA	1noyA	1pud	1aj8A	1anf	1pea	1moq	2polA	1adoA
1cem	2thiA	1jdw	1bjoB	1idk	1eceA	1uroA	2mnr	2bbkH

1a26	1cmkE	1a4mA	1uby	3pte	1afrA	1guqB	2liv	1rpt
1an9A	1uxy	1xikA	2omf	1gotB	1kvu	1arv	1nif	1prcC
1dxy	4pgaA	1a8e	1smeA	1htrB	1pscA	6ldh	1ipsA	6mhtA
1wer	1lct	1axn	1bg2	1bxo	1crxA	1pot	1ixh	2pia
1xyzA	2viuA	1tahA	1cknA	1tca	1onrA	1tadA	1tde	8tlne
1ads	1ft1A	1frb	1gsa	1rlaA	1fzaB	1mldA	2masA	1efvA
1vkxB	2cmd	1pprM	1pgs	2dorA	1hdeA	1itbB	1bgp	1mrp
1sbp	1gca	1ak1	2bbvA	2ctc	1aq0A	1ecrA	8abp	1mla
1irk	1esc	2por	1aijS	1jlyA	1cpo	1ezm	1aua	1ftrA
1fnc	1bjk	1fts	1xgsA	1c3d	1csn	2cyp	7ahlA	1rhs
1xvaA	1amp	1fdzB	1nar	1qapA	1vpsB	1prn	1tml	2ebn
1cfr	1cnv	1a9s	1aj2	1mpgA	1wgjA	1pyp	1a02N	1brt
1jkw	1agdA	2plc	3tdt	1cd1A	1arzC	2dri	1nsyA	1hsbA
3lck	1bc5A	1cp2A	1tib	1nzyA	1ako	1bev1	1exnB	1zid
1abrB	1imdA	1deaA	1pysA	1edt	3tgl	1ak0	1rgs	1arb
1lxa	1occC	2frvA	1cne	1jfrA	1poiB	1ystH	1plr	1tme1
1yasA	1knyA	1aym2	1efvB	1nbaB	1vin	1a28A	1btmA	1mml
1ospO	1amk	1hcz	1juk	1mrj	1mroC	1d2nA	1ah7	1aq6A
1rvaA	2baa	1agjA	1cydA	1led	1smnA	1dekA	1aym3	1chkA
1gdoA	1jmcA	3seb	1al3	1ecpA	1nls	1dhr	1bq3B	1lrv
1atg	1fvpA	1amf	1aol	1pyaB	1nfp	1lauE	1a7tA	1cby
1ad2	1dad	1akz	1bol	1smvC	1nlr	1a2zA	1aurA	1zin
6gsvA	1havA	1bquB	1dkzA	2ayh	1byqA	1lbu	1opr	1thjA
1ah6	1ahjB	1ppn	1wab	2trcP	1ebpA	2abk	1hxn	1glqA
1fc1A	1thv	1ai7A	1an8	1fua	1gnhA	2eiaA	1cfb	1csbB
1nsj	1avmA	1atlA	1nox	1iae	3pchA	1vcaA	1ahjA	1chd
1cex	1bcpC	1oakA	1tupA	1tx4A	1ukz	1nkr	1pbwB	1nksA
2tssA	1kid	1ycsB	2pth	1zxq	1aoeA	1etpA	1dlhB	1fvkA
1gky	1knb	1ad6	1ltsA	1xnb	153l	1atzA	1behA	1cawB
1ido	1np4	1xbrA	2stv	1gp1A	1tyfA	1bh5B	1ueaB	2ltnA
1ytbA	1cdi	1bnlA	1vhrA	1cid	1jxpA	1aocA	1aqb	2bpa2
2viuB	1obwA	1amm	2scpA	1alvA	1bxwA	1lki	2fha	1mkaA
1wba	9wgaA	1aew	1rcf	1ibcA	1mhyG	1au1A	5p21	1muga

1sfe	2arcB	2ucz	2cpl	1lopA	1vmoA	1a73A	1mtyG	1std
119l	1ble	1c25	1apyA	1awsA	1svpA	1extA	1u9aA	1a17
1bv1	1ra9	1aa7A	1bcfA	1cyx	1hjtA	1hfc	1hlb	1mup
1vhh	2pil	1bd8	1bebA	3pviA	1nbcA	2ilk	2rn2	1bisB
1dpsB	2gdm	2i1b	1asx	1a6g	1pboB	1sra	1yaiA	1rcy
1am7A	1amx	1npk	1div	2lhb	1osa	1a34A	1aohB	1ash
2hbg	2mtaC	1aly	1cmyB	1vls	1vsd	7at1B	1mba	1ak4C
1pkp	3sdhA	1occD	1tnrA	1at0	1tfe	1wdcB	1flp	1apyB
1guxB	1lcl	1stmA	2sns	1thbA	1avoB	1pne	1ayyA	1gtqA
3nll	2end	1an7A	1bo4B	1dupA	1eca	1poc	1rhoC	1cfyA
1ftpA	1jacA	1bkb	1kuh	1sltB	1danL	1c52	1hpcA	1lfc
1lit	1lid	1bbhA	1lis	1ayoA	1msc	1nbbA	1pdo	3lzt
1nwpA	3chy	1doi	1rie	2ccyA	3nul	1ttaA	1ahsA	1bfg
1rlw	1ar0A	1dfx	1otgA	2bbkL	2phy	1bgf	7rsa	1bdyA
1pdnC	8rucI	1burS	1a62	1bqhI	1mspB	1regX	1whi	2izhB
1buoA	2sak	1cot	1bnkA	1csgA	1dun	1paz	1mai	1rfaA
2rslC	1poa	2a0b	2mhr	1tmy	1dutA	1a2yB	1agrH	1bea
1bl0A	1rmd	1gifA	1tfpA	2chsA	2rhe	1aa0	2fivA	2mcm
2msbA	2pii	2tgi	1kpf	1sfp	2dynA	1bfeA	1bxo	1hcnB
1jer	1occE	1a2pA	1aoiG	1bkrA	1cewI	1hulA	1jpc	1rro
2trxA	1bkf	1g31A	2sicI	2spcA	1a1x	1btn	256bA	6fd1
1bxa	1erv	1kptA	1kte	1lkkA	2pspA	1if1B	1mypA	1skz
1cmbA	1iibA	1umuA	3chbD	1lt5D	1onc	1e2aA	1tul	1xer
1jhgA	1smtB	3vub	1puc	2kauB	1fwcA	1smpI	1idaA	1plc
1agdB	1beo	1mb1	1occF	1prtF	1tiiD	2acy	1aonO	1lou
1ihfA	1rgeA	2cbp	1cdcA	1agqD	1jrhI	1awd	1molA	1nsgB
1who	2vpfH	1bc8C	1mzm	1fna	1aw8E	1ten	1ctj	1cyo
1ibcB	1kwaA	1ycqA	1tig	1a68	1aba	1aoiF	1gvp	1lmb3
1unkA	1ptf	1an2A	1aliA	1hcnA	1lpbA	1opd	2bopA	1occG
5hpgA	1udiI	451c	1bdo	1npoC	1kveB	1mmnC	1vcc	1bg8A
1ubi	4icb	1tif	1occH	1hyp	1fzcA	1hoe	1sfcD	1doka
1sfcB	1xxaB	1dktB	1latA	1tvxB	1hpi	1tafB	1utg	1zmeC
1bovA	1jsuC	1sfcA	1tafA	1ctf	3il8	1msi	1pcfA	2nllA

2drpD	2sn3	1aho	1wdcA	1a0aA	1cseI	1kveA	1r69	1isuA
1nxb	1rpo	2igd	4mt2	1aojA	1scmA	1vif	1tgxA	1otfA
1gotG	2mev4	5pti	1fxd	1aboA	1a15B	1b2nB	1ckaA	1d66A
1lghA	1ropA	2fdn	1brf	1iro	1hcrA	1kigL	1sgpI	1tc3C
1occK	1yrnA	2ltnB	1fleI	1bazC	1vdfA	1ytfC	1xtcC	1htrP
1kzuB	1xdtR	2erl	1edmB	1dxgA	1aikC	1as4B	1aie	1benB

Tabelle 6.1: Set_{disk}

Das $\text{Set}_{\text{disk,keep}}$ enthält folgende 38 Strukturen aus Set_{disk} :

1vie	1tfe	1lcl	2end	1ifc	1lit	1lis	1pdo	1bfg
1bgf	1whi	1dun	1tmy	1bea	2rhe	2tgi	1sfp	1a1x
1erv	1kte	1tul	1mb1	1lou	1who	1fna	1ten	1tig
1a68	1ptf	1vcc	1ubi	1hyp	1hoe	3il8	1msi	1aho
1r69	2igd							

Tabelle 6.2: $\text{Set}_{\text{disk,keep}}$

Set_{45} :

1a1x	1a68	1aho	1ax8	1bea	1bfg	1bgf	1dun	1erv
1fna	1fus	1hoe	1hyp	1ifc	1kte	1lcl	1lis	1lit
1lou	1mb1	1msi	1neu	1nfn	1opy	1orc	1pdo	1ptf
1r69	1rss	1sfp	1ten	1tfe	1tig	1tmy	1tul	1ubi
1vcc	1vie	1whi	1who	2end	2igd	2rhe	2tgi	3il8

Tabelle 6.3: Set_{45}

Das Set_{135} enthält zusätzlich zu den Proteinen aus Set_{45} folgende Proteine:

153l	1a0p	1ab4	1ad6	1ah6	1ak1	1ako	1akz	1aly
1amm	1amx	1an8	1arb	1bam	1bd8	1beo	1bgc	1ble
1bol	1bv1	1bxx	1c25	1cby	1cdi	1cem	1ceo	1cex
1cfr	1chd	1cnv	1cuk	1dhx	1div	1dlc	1ecl	1edg

1edt	1esc	1fts	1gnd	1grj	1gso	1ha1	1hcl	1idk
1jkw	1kid	1knb	1lki	1lrv	1lst	1lxa	1maz	1mla
1mml	1nar	1nkr	1npk	1ois	1otp	1pgs	1pkp	1plr
1pta	1sfe	1sig	1thv	1tib	1tuc	1uch	1vin	1vjs
1vls	1wba	1wer	1ygs	2baa	2bct	2cpl	2eng	2i1b
2liv	2plc	2pth	2rn2	2sga	2ucz	3pte	3seb	3tgl

Tabelle 6.4: Set₁₃₅ ohne Set₄₅

Das Set₄₂₀ enthält zusätzlich zu den Proteinen aus Set₁₃₅ folgende Proteine:

119l	16pk	1a0i	1a17	1a26	1a3c	1a62	1a6q	1a7j
1a8d	1a8e	1a8i	1a9s	1aac	1aba	1acc	1ad2	1ads
1aew	1ah7	1aj2	1aj6	1ak0	1ak5	1al3	1alo	1alu
1amf	1amk	1amp	1anf	1anv	1aol	1aqb	1asx	1at0
1atg	1aua	1auk	1aw5	1awd	1axn	1ayl	1azo	1b0m
1bdo	1bfd	1bg0	1bg2	1bib	1bjk	1bkb	1bkf	1boo
1bpl	1brf	1brt	1btl	1btn	1bx9	1bxa	1bxo	1bxo
1byb	1c3d	1cfb	1cgt	1cid	1clc	1cne	1csh	1csn
1ctf	1cvl	1cyx	1dad	1dar	1ddt	1dfx	1dhy	1din
1doi	1dpe	1e2o	1euu	1ezm	1fdi	1fdr	1fds	1ffh
1fit	1fmk	1fnc	1frb	1fua	1fxd	1g3p	1gai	1gca
1gci	1gky	1goh	1gox	1gpl	1gsa	1hfc	1hpi	1hpm
1hxn	1iae	1ido	1ihp	1inp	1irk	1iro	1ixh	1jdw
1jer	1jpc	1juk	1kit	1kpf	1kuh	1lam	1lba	1lbu
1lct	1led	1lid	1ll1	1lml	1lnh	1mai	1mmg	1mnd
1moq	1mpp	1mrj	1mrp	1msk	1mup	1mxa	1mzm	1nfp
1nif	1nlr	1nls	1nom	1nox	1nsj	1nxb	1onc	1opd
1opr	1osa	1oyc	1paz	1pbe	1pda	1pea	1pex	1phm
1php	1pii	1plc	1pmi	1pne	1poa	1poc	1pot	1ppn
1prn	1pty	1pud	1qba	1qnf	1ra9	1rcf	1rcy	1rec
1rgs	1rhs	1rie	1rlw	1rmd	1rmg	1rnl	1rpt	1rro
1rsy	1sbp	1skz	1sly	1smd	1sqc	1sra	1std	1svb
1tca	1tde	1tfr	1thg	1tif	1tml	1toh	1uae	1uby
1ukz	1uxy	1v39	1vhh	1vid	1vsd	1wab	1xer	1xjo

1xnb	1yyc	1zid	1zin	1zxq	2a0b	2abk	2acy	2ayh
2bgu	2cba	2cbp	2cmd	2ctc	2dpg	2dri	2ebn	2emo
2erl	2fdn	2fha	2gar	2gep	2hft	2hts	2lbd	2mcm
2mhr	2mnr	2myr	2omf	2pgd	2phy	2pia	2pil	2por
2pvb	2qwc	2sak	2sn3	2sns	2stv	2tct	3chy	3cla
3cox	3dfr	3gcb	3grs	3lck	3lzt	3nll	3nul	3sil
3tdt	3vub	4bcl	4icb	4mt2	4xis	5eau	5p21	5pti
5ptp	6cel	6fd1	6ldh	7rsa	8abp			

Tabelle 6.5: Set₄₂₀ ohne Set₁₃₅

Das Set₁₀₁₄ enthält neben den Proteinen aus Set₄₂₀ folgende Strukturen:

1a02N	1a0aA	1a15B	1a1iA	1a28A	1a2pA	1a2yB	1a2zA	1a34A
1a4mA	1a4sA	1a6g	1a73A	1a7tA	1a9xB	1aa0	1aa7A	1ab8B
1aboA	1abrB	1adeA	1adoA	1aerA	1afrA	1afwA	1agdA	1agdB
1agjA	1agnA	1agqA	1agqD	1agrH	1ahjA	1ahjB	1ahsA	1ai7A
1aie	1aijS	1aikC	1aipA	1aj8A	1ajsA	1ajsB	1ak4C	1alvA
1am7A	1amuA	1an2A	1an7A	1an9A	1ao6A	1aocA	1aoeA	1aohB
1aoiF	1aoiG	1aojA	1aonO	1aoqA	1aorA	1aozA	1apyA	1apyB
1aq0A	1aq6A	1aquB	1aqzB	1ar0A	1ar1A	1arv	1arzC	1as4B
1ash	1asyA	1atiB	1atlA	1atzA	1au1A	1aurA	1auvA	1avmA
1avoB	1avwB	1aw8E	1awsA	1ax4A	1axiB	1axwA	1aym2	1aym3
1ayoA	1ayyA	1b2nA	1b2nB	1bazC	1bbhA	1bbpA	1bc5A	1bc8C
1bcfA	1bcpC	1bd0A	1bdb	1bdmA	1bdyA	1bebA	1behA	1benB
1bev1	1bf5A	1bfeA	1bg8A	1bgp	1bh5B	1bisB	1bjoB	1bkrA
1bl0A	1bmdA	1bncB	1bndB	1bnkA	1bnlA	1bo4B	1bovA	1bp3A
1bq3B	1bqhI	1bquB	1btkB	1btmA	1bu7A	1buoA	1burA	1burS
1bvsB	1bxwA	1byqA	1c52	1cawB	1cbuC	1cd1A	1cdcA	1cewI
1cfyA	1cg2A	1chkA	1chmA	1ckaA	1cknA	1cl1A	1cmbA	1cmkE
1cmYB	1cnt2	1cot	1cp2A	1cpcB	1cpo	1crxA	1csbB	1cseE
1cseI	1csgA	1ctj	1cumA	1cydA	1cyo	1d2nA	1d66A	1danL
1danU	1deaA	1dekA	1dfjI	1dhr	1dhs	1dkgA	1dkgD	1dktB
1dkzA	1dlhB	1dokA	1dosA	1dpsB	1dupA	1dutA	1dvfD	1dxgA
1dxy	1e2aA	1ebpA	1eca	1eceA	1ecfA	1ecpA	1ecrA	1edmB
1efvA	1efvB	1elyA	1eptB	1esfA	1etpA	1exnB	1extA	1f13B

1fc1A	1fcdA	1fdzB	1fgjA	1fiaA	1fjmB	1fleI	1flp	1fmtB
1fokA	1fpkA	1frpA	1frvB	1fssA	1ft1A	1ft1B	1ftpA	1ftrA
1fuiA	1furA	1fvkA	1fvpA	1fwcA	1fzaB	1fzcA	1g31A	1gc1G
1gd1O	1gdoA	1gifA	1glqA	1gnhA	1gotB	1gotG	1gp1A	1gpmB
1gr2A	1gtqA	1gukB	1guqB	1guxB	1gvp	1gylA	1havA	1hcnA
1hcnB	1hcrA	1hcz	1hdeA	1heiB	1hgxB	1hjrA	1hkbA	1h1b
1hpcA	1hrdA	1hsbA	1htrB	1htrP	1hulA	1hxpA	1hyxL	1iakA
1ibcA	1ibcB	1idaA	1if1B	1ignA	1ihfA	1ihvA	1iibA	1imdA
1ipsA	1ipwA	1iso	1isuA	1itbB	1ixmB	1jacA	1jdbK	1jetA
1jfrA	1jhgA	1jlyA	1jmcA	1jrhI	1jsuC	1jxpA	1kapP	1kb5B
1kigL	1kimA	1kmnA	1knyA	1kptA	1kveA	1kveB	1kvu	1kwaA
1kzuB	1latA	1lauE	1ldg	1lghA	1lkkA	1lktA	1lmb3	1lopA
1lpbA	1lt5D	1ltsA	1lucA	1lxtA	1mabG	1mba	1mhyB	1mhyD
1mhyG	1mkaA	1mldA	1mnmC	1molA	1mpgA	1mroA	1mroB	1mroC
1msc	1mspB	1mtyB	1mtyD	1mtyG	1mucA	1mugA	1mypA	1nbaB
1nbbA	1nbcA	1nciA	1nfdA	1nksA	1nocA	1noyA	1np4	1npoC
1nscA	1nsgB	1nsyA	1nulA	1nulB	1nwpA	1nzyA	1oakA	1obwA
1occC	1occD	1occE	1occF	1occG	1occH	1occK	1ofgA	1oneA
1onrA	1ospO	1otfA	1otgA	1ovaA	1ovaC	1p04A	1pboB	1pbwB
1pcfA	1pdgC	1pdnC	1phc	1phnA	1phnB	1pinA	1pioA	1pk1B
1pnkB	1poiA	1poiB	1pprM	1prcC	1preB	1prtF	1prxB	1ps1A
1pscA	1puc	1pyaB	1pyp	1pysA	1pytA	1qapA	1qatA	1qtqA
1regX	1reqB	1rfbA	1rgeA	1rhoC	1rlaA	1rom	1ropA	1rpo
1rusA	1rvaA	1ryp1	1ryp2	1scmA	1serA	1sfcA	1sfcB	1sfcD
1sgpI	1shkA	1skyE	1sltB	1sluA	1smeA	1smnA	1smpI	1smtB
1smvC	1spuA	1stfl	1stmA	1svpA	1tabI	1tadA	1tafA	1tafB
1tahA	1tc3C	1tf4A	1tfpA	1tgsI	1tgxA	1thbA	1thjA	1thtA
1tiiD	1tkaA	1tme1	1tnrA	1ttaA	1tupA	1tvxB	1tx4A	1tyfA
1u9aA	1uaaA	1udiI	1ueaB	1umuA	1unkA	1uroA	1utg	1vba4
1vcaA	1vdfA	1vhrA	1vif	1vkxB	1vmoA	1vpsB	1wdcA	1wdcB
1wgjA	1whtA	1whtB	1wpoB	1xbrA	1xdtR	1xgsA	1xikA	1xsoA
1xteC	1xvaA	1xxaB	1xyzA	1yaiA	1yasA	1ycc	1ycqA	1ycaB
1ypdA	1yrnA	1ystH	1ytbA	1ytfC	1ytfD	1yveI	1zmeC	1znba
256bA	2arcB	2bbkH	2bbkL	2bbvA	2bopA	2bpa1	2bpa2	2cae
2ccyA	2chsA	2cyp	2dnjA	2dorA	2drpD	2dubE	2dynA	2eiaA

2fivA	2frvA	2gdm	2hbg	2hlcA	2hmzA	2ilk	2izhB	2kauB
2kauC	2ldb	2lgsA	2lhb	2ltnA	2ltnB	2masA	2mev4	2mprA
2msbA	2mtaC	2nacA	2nllA	2pii	2polA	2pspA	2rslC	2rspA
2rspB	2scpA	2sicI	2spcA	2thiA	2tmkA	2trcP	2trxA	2tssA
2tysA	2vaoA	2vhbB	2viuA	2viuB	2vpfH	3btoA	3chbD	3daaA
3gsaA	3mddA	3minA	3minB	3pbgA	3pcgM	3pchA	3pviA	3r1rA
3sdhA	3ullB	451c	4dpvZ	4htcI	4pgaA	5csmA	5hpgA	6gsvA
6insE	6mhtA	6pfkA	7ahlA	7at1B	8fabB	8rucI	8tlnE	9wgaA

Tabelle 6.6: Set₁₀₁₄ ohne Set₄₂₀

6.2 Die 20 natürlichen Aminosäuren

Die 20 natürlichen Aminosäuren mit ihren gängigen Abkürzungen und Seitenketten.

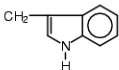
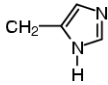
Name	Abkürzungen	Seitenkette
Alanin	Ala A	CH_3
Valin	Val V	$CH(CH_3)_2$
Glycin	Gly G	H
Leucin	Leu L	$CH_2 - CH(CH_3)_2$
Isoleucin	Ile I	$CH(CH_3) - CH_2 - CH_3$
Methionin	Met M	$CH_2 - CH_2 - S - CH_3$
Prolin	Pro P	$CH_2 - CH_2 - CH_2 - X$
		X ist die Aminogruppe des Grundgerüsts
Phenylalanin	Phe F	$CH_2 - \emptyset$
		
Tryptophan	Trp W	
Serin	Ser S	$CH_2 - OH$
Threonin	Thr T	$CH(OH) - CH_3$
Asparagin	Asn N	$CH_2 - CO - NH_2$
Glutamin	Gln Q	$CH_2 - CH_2 - CO - NH_2$
Tyrosin	Tyr T	$CH_2 - \emptyset - OH$
Cystein	Cys C	$CH_2 - SH$
Lysin	Lys K	$CH_2 - CH_2 - CH_2 - CH_2 - NH_3^+$
Arginin	Arg R	$CH_2 - CH_2 - CH_2 - NH - C(NH_2)^+$
		
Histidin	His H	
Aspartat	Asp D	$CH_2 - COO^-$
Glutamat	Glu E	$CH_2 - CH_2 - COO^-$

Tabelle 6.7: Liste der Aminosäuren mit Abkürzungen und Seitenketten

\emptyset steht für einen Phenylring.

6.3 Abkürzungsverzeichnis

CHARMM	Chemistry at Harvard Macromolecular Mechanics
boltz _x	Boltzmann-gewichtete Optimierung (siehe 2.9) unter Verwendung von Proteinset x
LO _x	lineare Optimierung (Gleichung 2.24) unter Verwendung von Proteinset x
QCM _x	Quasichemische Methode ohne Gewichtung (Gleichung 2.33) unter Verwendung von Proteinset x
QCMw _x	Quasichemische Methode mit Gewichtung (Gleichung 2.35) unter Verwendung von Proteinset x
QCMw _{0.2/x}	Quasichemische Methode mit Gewichtung. Für das Training der Kontaktenergieparameter wird Set _x verwendet. Nur <i>Decoys</i> mit einem <i>Overlap</i> $q \leq 0.2$ kommen für das Training zur Anwendung.
q_{\max}	Höchster <i>Overlap</i> q aller <i>Decoys</i> , die unter Verwendung eines gegebenen Proteinsets zu einer gegebenen nativen Struktur erzeugt werden.
q_{\min}	<i>Overlap</i> des energieärmsten <i>Decoys</i>
MC	Monte Carlo

6.4 Publikationen

- U. Bastolla, J. Farwer, E. W. Knapp, M. Vendruscolo (2001). How to guarantee optimal stability for most representative structures in the protein data bank. *Proteins* 44: 79-96.
- S. Wallin, J. Farwer, U. Bastolla (2003). Testing similarity measures with continuous and discrete protein models. *Proteins* 50:144-57.

6.5 Poster

- September 2000 Protein structure prediction using threading, Annual Meeting of the Swedish Biophysical Society Swedish Biophysical Society, Linköping, Sweden
- September 2000 Protein structure prediction using threading, European Biophysics Conference 2000, European Biophysical Societies' Association, München
- Mai 2001 Deriving an energy function that recognizes native protein structures, Biophysical Aspects of Electron and Proton Transfer/Computer Simulation and Theory of Biomolecules, Hünfeld
- August 2001 A contact energy function optimized to recognize the native fold of a protein, Graduiertenkolleg: Biophysics and Bioinformatics Workshop Berlin 2001
- Januar 2002 A contact energy function optimized to recognize the native fold of a protein, Flexibility and Function of Proteins, Heidelberg
- April 2002 A contact energy function optimized to recognize the native fold of a protein, Computer Simulation and Theory of macromolecules 2002, Hünfeld
- Juli 2002 A contact energy function optimized to recognize the native fold of a protein, Graduiertenkolleg: Bioinformatics Workshop, Boston, USA

6.6 Vorträge

- März 2000 Deriving an energy function that recognizes native protein structures, Graduiertenkolleg: International Workshop Berlin 2000
- Mai 2000 Deriving an energy function that recognizes native protein structures, Charité Berlin, Institut für Biochemie
- Oktober 2000 Protein structure prediction using threading (Vortrag), Charité Berlin, Institut für Biochemie
- August 2001 A contact energy function optimized to recognize the native fold of a protein, Graduiertenkolleg: Biophysics and Bioinformatics Workshop Berlin 2001

6.7 Lebenslauf

9.2.1970	geboren in Hamburg
1986	Realschulabschluss, Heinrich-Hertz-Schule, Hamburg
1986	Beginn einer Ausbildung zum Elektromechaniker bei der Deutschen Bundespost
1987	Abbruch der Ausbildung nach einem Motorradunfall
1988	Beginn Gymnasium im zweiten Bildungsweg, Lohmühlengymnasium, Hamburg
1993	Abitur
1993-1995	Grundstudium der Biochemie an der Martin-Luther-Universität, Halle/Saale
1995-1998	Hauptstudium der Biochemie an der Universität Hannover
1998	Diplomarbeit an der Medizinische Hochschule Hannover, Institut für biophysikalische Chemie in der Arbeitsgruppe von Prof. Maaß. Titel: „Das TraM-Protein des konjugativen Plasmides F aus <i>Escherichia coli</i> : Wechselwirkungen mit spezifischen DNA-Sequenzen des konjugativen Ursprungs.“
1999	Beginn der Promotion an der freien Universität Berlin in der Arbeitsgruppe von Prof. Ernst-Walter Knapp als Stipendiat des Graduiertenkollegs „Dynamik und Evolution zellulärer und makromolekularer Prozesse.“
seit Januar 2003	Wissenschaftlicher Mitarbeiter an der Universität Sheffield, Großbritannien im Rahmen eines europäischen Netzwerkes. Thema: theoretische Studien zu DNA/Kohlenhydrat Wechselwirkungen.

6.8 Erklärung

Hiermit versichere ich, die vorliegende Dissertation selbständig und ohne unerlaubte Hilfe angefertigt zu haben. Bei der Verfassung der Dissertation wurden keine anderen als die im Text aufgeführten Hilfsmittel verwendet. Ein Promotionsverfahren zu einem früheren Zeitpunkt an einer anderen Hochschule oder bei einem anderen Fachbereich wurde nicht beantragt.

Berlin, den 21.05.2005