

7. Anhang

7.1. Abbildungsverzeichnis

Die Raytracing-Abbildungen der Moleküle wurden unter Verwendung der Programme BOBSCRIPT (Esnouf, 1997), RASTER3D (Merrit & Bacon, 1997) und SWISSPROT-VIEWER (Guex & Peitsch, 1997) erzeugt.

Abb. 1.1 Die tRNA ^{Ala} aus <i>Escherichia coli</i>	5
Abb. 1.2 Hybridstruktur bei der Replikation des HIV-I Virus	8
Abb. 1.3 Tertiärstruktur von CspB	12
Abb. 2.1 Elutionsprofil der Anionenaustausch-Chromatographie von HIV ^{Chi}	17
Abb. 2.2 Kristallisation von Nukleinsäuren	19
Abb. 2.3 Schematischer Aufbau eines Elektronensynchrotrons der 3. Generation (BESSY II)	21
Abb. 2.4 Experimentelle Anordnung des Diffraktionsexperiments bei tiefen Temperaturen	23
Abb. 2.5 Argand-Diagramm der Phasenbestimmung mittels isomorphem Ersatz	28
Abb. 2.6 HARKER-Konstruktion für die Phasenbestimmung mit einem Schweratom-Derivat	28
Abb. 2.7 Argand-Diagramm für die anomale Diffraktion	29
Abb. 2.8 HARKER-Konstruktion der SIRAS-Methode	30
Abb. 2.9 Schematischer Ablauf der Verfeinerung von HIV ^{Chi} mit XPLOR	41
Abb. 2.10 Übergang des isotropen in den anisotropen B-Faktor	44
Abb. 2.11 Schematische Darstellung der Einschränkungen der anisotropen B-Faktorverfeinerung	45
Abb. 3.1 Kristalle der tRNA ^{Ala} -Akzeptorstämme	52
Abb. 3.3 Stereochemisch falsche Lösung für ALA ^{wt}	54
Abb. 3.4 Als "starrer Körper" verfeinerte Lösung des Molekularen Ersatzes der ALA ^{C70} -Helix	55
Abb. 3.5 Schweratom-Derivat 5-Iod-Uridin	56
Abb. 3.6 Auflösungsabhängigkeit der isomorphen und anomalen	57
Abb. 3.7 HARKER-Ebene u0w	58
Abb. 3.8 Strukturlösung von ALA ^{wt}	60
Abb. 3.9 Verfeinerte Strukturmodelle mit (2mFo-DFc)-Elektronendichten bei 1.5 σ konturiert	61
Abb. 3.10 Fehlordnung von ALA ^{C70} in der monoklinen Zelle	62
Abb. 3.11 Experimentell ermittelter mittlerer atomarer Koordinatenfehlers von ALA ^{wt} und ALA ^{C70}	66

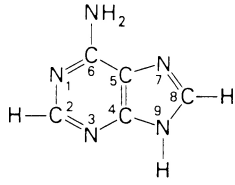
Abb. 3.12 Qualität des verfeinerten Strukturmodells am Beispiel von U6-ALA ^{wt} -A	67
Abb. 3.13 Kristallpackung von ALA ^{wt}	72
Abb. 3.15 Auswirkungen der Insertion des G•U-Basenpaares	74
Abb. 3.16 Die Struktur des G3•U70-Basenpaares von ALA ^{wt} mit spezifischer Wasserkoordination	78
Abb. 3.17 Die Struktur des G3-C70-Basenpaar von ALA ^{C70} mit spezifischer	79
Abb. 3.18 Besetzung spezifischer Koordinationsstellen in der kleinen und großen	81
Abb. 3.19 Stabilisierung des Kristallgitters von ALA ^{wt} durch Sr ²⁺	82
Abb. 3.20 Kristalle der HIV ^{Chi} –Doppelhelix r(gcaguggc)•r(gcca)d(CTGC)	84
Abb. 3.21 Darstellung des verfeinerten Strukturmodells von HIV ^{Chi}	89
Abb. 3.22 Packungseigenschaften von HIV ^{Chi} in der orthorhombischen Elementarzelle	90
Abb. 3.23 Die asymmetrische Einheit von HIV ^{Chi}	91
Abb. 3.24 Stapelung des g1-C16-Basenpaares in die kleine Furche eines Nachbarmoleküls	91
Abb. 3.25 Überlagerung von HIV ^{Chi} -A mit -B	94
Abb. 3.26 Vergleich helikaler Parameter von HIV ^{Chi} -A und HIV ^{Chi} -B	96
Abb. 3.27 Die Basenpaarstapelung des c2-G15/a3-T14-Schritts	97
Abb. 3.28 Das all-trans Phosphatrückgrat im Bereich von 5'-c2pa3-3' bei HIV ^{Chi}	97
Abb. 3.29 Intrastrang-Phosphatabstände von HIV ^{Chi}	98
Abb. 3.30 Positionen der Haupt- und Nebenschnittstellen der RT-assoziierten RNase-H	99
Abb. 3.31 Kristalle von A) <i>Bc</i> -Csp und B) <i>Bc</i> -Csp ^{R3E}	101
Abb. 3.32 Ramachandran-Diagramm	108
Abb. 3.33 Mittlerer Koordinatenfehler der Hauptkettenatome	109
Abb. 3.34 Mittlerer isotroper B-Faktor der Hauptkettenatome	109
Abb. 3.35 Mittlere Anisotropie der Hauptkettenatome	110
Abb. 3.36 Abweichung von der Planarität der Peptidbindung	111
Abb. 3.37 Anisotropieellipsoide (P=50%) der C α -Atome der Polypeptidkette von <i>Bc</i> -Csp-A	112
Abb. 3.38 2D- und 3D-Sekundärstrukturdiagramm von <i>Bc</i> -Csp	113
Abb. 3.39 Darstellung der β -Fasstruktur von <i>Bc</i> -Csp	113
Abb. 3.40 Homodimerstruktur von <i>Bc</i> -Csp	114
Abb. 3.41 Intermolekulares antiparalleles Faltblatt bei der Dimerwechselwirkung von <i>Bc</i> -Csp	115
Abb. 3.42 C α -Überlagerung von <i>Bc</i> -Csp-A mit <i>Bc</i> -Csp-B, <i>Bc</i> -Csp ^{R3E} -A und <i>Bc</i> -Csp-A sowie <i>Bc</i> -Csp-A mit CspB	117
Abb. 3.43 Stabilisierung des Schleifenbereichs S2 von <i>Bc</i> -Csp-A.	118
Abb. 3.44 Hauptkettenatome und Seitenkette des P58 von <i>Bc</i> -Csp-A farbig und CspB grau gefärbt, nach Überlagerung der C α -Positionen des Schleifenbereich S4.	119

Abb. 3.45 R3E-Mutationsbereich des <i>Bc</i> -Csp	120
Abb. 3.46 Alternative Seitenkettenkonformationen von <i>Bc</i> -Csp	123
Abb. 3.47 Verteilung der Wassersauerstoffpositionen um das Proteinmolekül von <i>Bc</i> -Csp und der Koordinatenfehler in Abhängigkeit vom B-Faktor.	125
Abb. 3.48 TRIS-Bindung innerhalb der <i>Bc</i> -Csp-Struktur	126
Abb. 3.49 Packung von <i>Bc</i> -Csp innerhalb der I4 ₁ Zelle	126

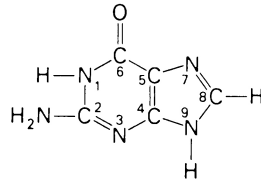
7.2. Tabellenverzeichnis

Tab. 1.1 Strukturelle Eigenschaften kanonischer DNA-Formen	3
Tab. 1.2 Primärstrukturvergleich von <i>Bc</i> -Csp und CspB	13
Tab. 1.3 Thermodynamische und kinetische Daten der Csp-Proteine	14
Tab. 2.1 Molare Massen und Extinktionskoeffizienten der Akzeptorstamm-RNA	15
Tab. 2.2 Molare Massen und Extinktionskoeffizienten der HIV ^{HIVChi} -Einzelstränge	16
Tab. 2.3 Verfeinerbare Modellparameter eines Diffraktionsexperiments	26
Tab. 2.4 Indikatoren perfekter merohedralear Zwillingsbildung	37
Tab. 3.1 Optimale Kristallisationsbedingungen der RNA-Heptamere	49
Tab. 3.2 Diffraktionsexperimente an tRNA ^{Ala} -Akzeptorstämmen	51
Tab. 3.3 Statistik der Strukturlösung von ALA ^{C70} durch Molekularen Ersatz	55
Tab. 3.4 Iod-Koordinaten nach Analyse der Pattersonfunktionen	57
Tab. 3.5 Statistiken der Phasenverfeinerung	59
Tab. 3.6 Molekularer Ersatz in Raumgruppe P1 für ALA ^{wt} und ALA ^{C70}	64
Tab. 3.7 Ergebnisse der Zwillingsverfeinerung von ALA ^{wt} , ALA ^{I-U6} und ALA ^{C70}	65
Tab. 3.8 Globale helikale Parameter, die den A-Form Konformationstyp bestimmen	69
Tab. 3.9 Rms-Abweichungen äquivalenter Atome superpositionierter Moleküle	71
Tab. 3.10 Torsionswinkel und Standardabweichungen des RNA-Rückgrats und der Ribosen von ALA ^{wt} und ALA ^{C70}	76
Tab. 3.11 Statistik der vereinigten Daten des Diffraktionsexperiments	85
Tab. 3.12 Statistik der Strukturlösung von HIV ^{Chi} durch Molekularen Ersatz	87
Tab. 3.13 Statistik der Verfeinerung von HIV ^{Chi}	89
Tab. 3.14 Globale helikale Parameter von HIV ^{Chi} im Vergleich mit kanonischer A-DNA	93
Tab. 3.15 Torsionswinkel und Standardabweichungen des RNA- und DNA-Rückgrats und Pseudorotationsphasen der Ribosen/Desoxyribosen von HIV ^{Chi}	95
Tab. 3.16 Kristallisationsbedingungen für <i>Bc</i> -Csp und <i>Bc</i> -Csp ^{R3E}	100
Tab. 3.17 Statistik der vereinigten Daten der Diffraktionsexperimente	102
Tab. 3.18 Statistik der Strukturlösung von <i>Bc</i> -Csp durch molekularen Ersatz	104
Tab. 3.19 Statistik der Strukturverfeinerung von <i>Bc</i> -Csp und <i>Bc</i> -Csp ^{R3E}	107
Tab. 3.20 Intermolekulare Wechselwirkungen in <i>Bc</i> -Csp-Dimeren	115
Tab. 3.21 Superpositionierung der Kälteschockproteine	116
Tab. 3.22 Aminosäuren mit alternativen Seitenkettenkonformationen bei CspB	122
Tab. 3.23 Aminosäuren mit alternativen Seitenkettenkonformationen bei <i>Bc</i> -Csp ^{R3E}	124
Tab. 3.24 Aminosäuren mit intermolekularen Proteinkontakten bei <i>Bc</i> -Csp	127

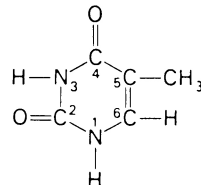
7.3. Nukleinsäurebausteine



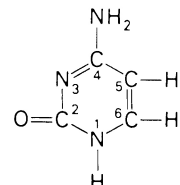
Adenin
(A)



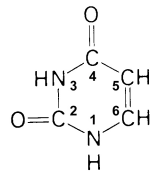
Guanin
(G)



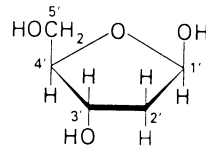
Thymin
(T)



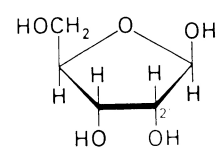
Cytosin
(C)



Uracil



β -D-2-Desoxyribose



Ribose

7.4. Standard-Aminosäuren

