



Universiteit
Leiden
The Netherlands

Modelling copper-containing proteins

Bosch, Marieke van den

Citation

Bosch, M. van den. (2006, January 18). *Modelling copper-containing proteins*. Retrieved from <https://hdl.handle.net/1887/4361>

Version: Corrected Publisher's Version

License: [Licence agreement concerning inclusion of doctoral thesis in the Institutional Repository of the University of Leiden](#)

Downloaded from: <https://hdl.handle.net/1887/4361>

Note: To cite this publication please use the final published version (if applicable).

LIST OF PUBLICATIONS

Hyperthermophilic redox chemistry: a re-evaluation.

Hagedoorn PL, MCPF Driessen, M van den Bosch, I Landa & WR Hagen.
FEBS LETTERS (1998) 440, 311.

Fitting of the beat pattern observed in NMR free-induction decay signals of concentrated carbohydrate-water solutions

Derbyshire W, M van den Bosch, D van Dusschoten, W MacNaughtan, IA Fahrat, MA Hemminga & JR Mitchell.

JOURNAL OF MAGNETIC RESONANCE (2004) 168, 278.

A new type-II copper cysteinate azurin - Involvement of an engineered exposed cysteine in copper binding through internal rearrangement.

van Amsterdam IMC, M Ubbink, M van den Bosch, F Rotsaert, J Sanders-Loehr & GW Canthers.

JOURNAL OF BIOLOGICAL CHEMISTRY (2002) 277, 4412.

Calculation of the redox potential of the protein azurin and some mutants.

van den Bosch M, Swart M, Snijders JG, Berendsen HJC, Mark AE, Oostenbrink C, van Gunsteren WF & Canthers GW.

CHEMBIOCHEM (2005) 6, 738.

Simulation of the substrate cavity dynamics of quercetinase.

van den Bosch M, M Swart, WF van Gunsteren & GW Canthers.

JOURNAL OF MOLECULAR BIOLOGY (2004) 344, 725.

IntraFF: obtaining reliable force constants from quantum chemical calculations.

Swart M, M van den Bosch, HJC Berendsen, GW Canthers, AE Mark & JG Snijders.

JOURNAL OF COMPUTATIONAL CHEMISTRY, submitted.

Dynamics analysis of the hydrophobic core of the blue copper protein azurin.

van den Bosch M, C Oostenbrink, WF van Gunsteren & GW Canthers.
to be submitted.

Type-I Cu-proteins, a Molecular Dynamics Study.

van den Bosch M & GW Canthers.
to be submitted.

CURRICULUM VITAE

Marieke van den Bosch werd op 17 juli 1975 te Stiphout geboren. Na het doorlopen van de lagere school (Sint Trudo school) en middelbare school (Scholen Gemeenschap Jan van Brabant) is zij in 1993 fysica gaan studeren aan de Universiteit van Utrecht. In 1994 begon zij de studie Moleculaire Wetenschappen aan de toenmalige Landbouw-universiteit Wageningen. Gedurende deze periode heeft zij onder begeleiding van Dr. W. R. Hagen de temperatuurs- en pH-afhankelijkheid onderzocht van de redox potentiaal van ijzer-bevattende eiwitten en bij Organon in Oss onder begeleiding van Dr. R. Buma onderzoek gedaan naar de relatie tussen de structuur en de biologische bindingsaffiniteit van hormonen op grond van spectroscopische gegevens. Ter afronding van haar studie heeft ze in Loughborough aan de University of Nottingham (VK) onder begeleiding van Prof. Dr. W. Derbyshire verschillende wiskundige modellen gebruikt om NMR free-induction decays te fitten van suikers in de glastoestand. Na haar studie te hebben voltooid is zij in 1999 een promotie onderzoek begonnen onder leiding van Prof. Dr. G. W. Canters aan de Universiteit Leiden. In deze studie zijn verschillende eigenschappen van koper-bevattende eiwitten met behulp van rekentechnieken geanalyseerd.

NAWOORD

Toen ik kwam solliciteren was er een plaats voor een onderzoeker in opleiding die onderzoek zou gaan verrichten in het project ‘Modelling metal-based biological redox reactions’. De doelstelling van het project zoals beschreven in de advertentie omvatte: “ a) de ontwikkeling van een ‘force field’ voor metaal-centra in kopereiwitten; b) de ontwikkeling van een gemengd klassieke/QM beschrijving van redox-eiwitten en -enzymen die geschikt is om het gedrag in ruimte en tijd van deze eiwitten te simuleren; c) de analyse van de redoxeigenschappen en het mechanistische gedrag van koper bevattende enzymen en eiwitten m.b.v. MD-simulaties”. Na 6 jaar hierop terugkijkend kan ik concluderen dat het onderzoek beschreven in mijn proefschrift vrij nauwkeurig het indertijd uitgestippelde plan heeft gevolgd. Dit is natuurlijk niet vanzelf gegaan en graag wil ik een aantal mensen bedanken voor hun bijdragen.

Allereerst wil ik Marcel Swart bedanken voor zijn steun en enthousiasme in de ontwikkeling van het QM force field. De Metprot groep in Leiden heeft, naast het organiseren van verschillende buitengewoon goede etentjes, mij geholpen bij het ‘lezen’ van experimentele gegevens van de te simuleren kopereiwitten. De MD-groep in Groningen ben ik zeer erkentelijk voor hun inspanningen om mij wegwijs te maken in de Moleculaire-Dynamicsimulaties. Tevens wil ik Chris Oostenbrink bedanken voor het installeren van verschillende modules en het helpen met de interpretatie van de simulaties. Hiernaast wil ik Cees Erkelens en Anna Karawajczyk bedanken voor de hardware en software support. Tevens was dit proefschrift niet tot stand gekomen zonder al mijn vrienden die mij altijd weer wisten op te beuren als het even tegen zat met een stevig biertje of een potje kaart en het voetbalteam waar ik altijd mijn frustratie op kon botvieren. Tot slot wil ik mijn ouders bedanken die altijd voor me klaar stonden, of het nou om een kapot vliegtuig in Ghana of een gebroken been ging en die misschien wel meer zorgen hebben gehad over het project dan ik zelf.
