



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).

Stellingen
behorende bij het proefschrift
Modelling copper-containing proteins

- 1 De keuze, welke parameters te gebruiken om een metaal-eiwit te modeleren, zou voornamelijk af moeten hangen van de te simuleren eigenschap.

dit proefschrift

- 2 Mutaties die een toename van mobiliteit veroorzaken in de directe omgeving van een fosforescerende “probe” in een eiwit hoeven niet daadwerkelijk te resulteren in een kortere fosforescente levensduur van die “probe”.

dit proefschrift, hoofdstuk 4

- 3 Met de huidige faciliteiten is het niet mogelijk verschillen in redoxpotentiaal tussen een eiwit in zijn natieve vorm en een variant te berekenen met een nauwkeurigheid die beter is dan $\frac{kT}{nF}$, met andere woorden $\Delta\Delta G < kT$.

dit proefschrift, hoofdstuk 5

- 4 De huidige theoretische instrumenten zijn betrouwbaar genoeg om “substrate binding modes” te identificeren, om het effect van het substraat op het eiwit en andersom te bestuderen en om onderscheid te maken tussen verschillende mogelijke reactiemechanismen.

Bjelic & Aqvist 2004, *Biochemistry* **43**: 14521-14528

Almlof et al. 2004, *J. Comp. Chem.* **10**: 1242-1254

Wachter & Branchaud 1996, *J. Am. Chem. Soc.* **118**: 2782-2789

Falconi et al. 2001, *Biophys. J.* **80**: 2556-2567

dit proefschrift, hoofdstuk 6

- 5 De precisie van het berekende verschil in redoxpotentiaal tussen twee verschillende eiwitten wordt naast de mate van sampling voornamelijk bepaald door het gebruikte krachtveld.

de Kerpel & Ryde 1999, *Proteins* **36**: 157-174

Formanek et al. 2002, *J. Theor. Comp. Chem.*, **1**: 53-67

- 6 Bij de ontwikkeling van potentiële substraten en “inhibitors” van een enzym is het noodzakelijk om de flexibiliteit van het eiwit en het effect van het oplosmiddel mee te nemen in de beschouwingen.

Park et al. 2004, *ChemBioChem* **5**: 1–11

Zoete et al. 2003, *J. Comp. Aid. Mol. Des.* **17**: 861–880

- 7 Het waterstofbrug-netwerk in de tweede coördinatieschil van een metaal-centrum in een eiwit heeft een grote invloed op de electronische eigenschappen van dit centrum.

Dal Peraro et al. 2002, *J. Biol. Inorg. Chem.* **7**: 704-712

Gervasio et al. 2003, *J. Phys. Chem. B* **107**: 6886-6892

Dudev et al. 2003, *J. Am. Chem. Soc.* **125**: 3168-3180

Musiani et al. 2004, *J. Phys. Chem. B* **108**: 7495-7499

- 8 De verschillende modellen van Leiden in verschillende tijdvakken geven blijk hoe, net als een eiwit, een stad er totaal anders uit kan zien naar gelang een ander model wordt gebruikt of een ander tijdsbestek wordt belicht.

- 9 Als je voor elke positie de beste speler kiest, heb je nog geen sterk elftal maar een team dat als los zand uiteen valt.

- 10 Sporten zou verboden moeten worden gezien de hoeveelheid blessures die het oplevert.

- 11 De koers-index van een land zegt niets over de koers van een land.

Marieke van den Bosch
Leiden, januari 2006