

KNUDER I ANVENDELSER

Regionalmøde Esbjerg 2012

Lisbeth Fajstrup

Aalborg Universitet

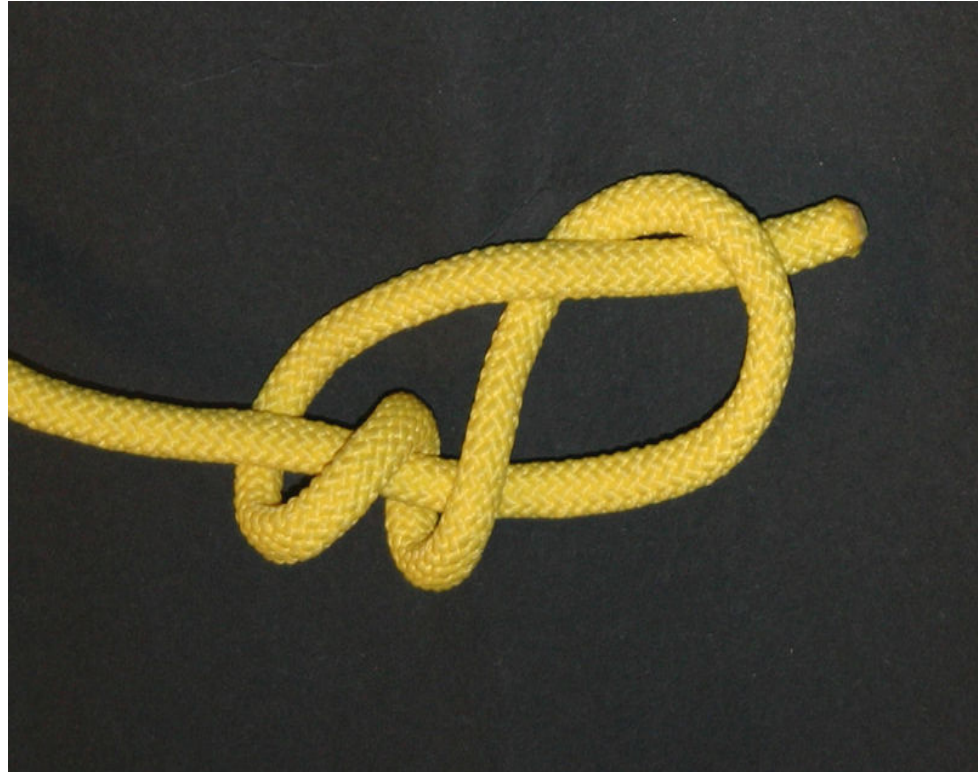
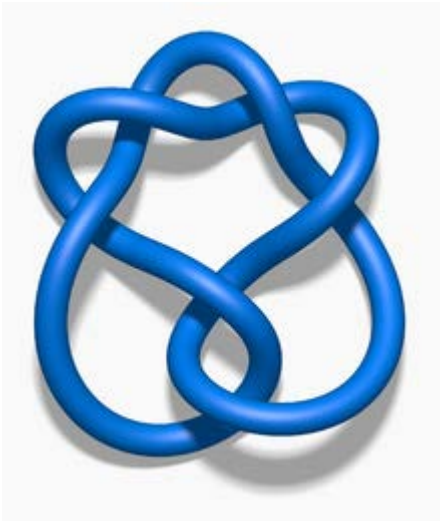
Knuder på molekyler

- Molekylerne skal være lange nok
- Måske ikke lukket sammen, men med lange ender, så knuden ikke let går op – et passende stort antal aminosyrer skal falde af, for at knuden går op.
- Proteiner, DNA
- Syntetiserede molekyler- konstruer stoffer med nye egenskaber
- Naturligt forekommende i DNA og proteiner
- Foldning af proteiner som online projekt:
<http://fold.it/portal/> Foreløbig to artikler i Nature.
- Mål: Fold et protein mest muligt.

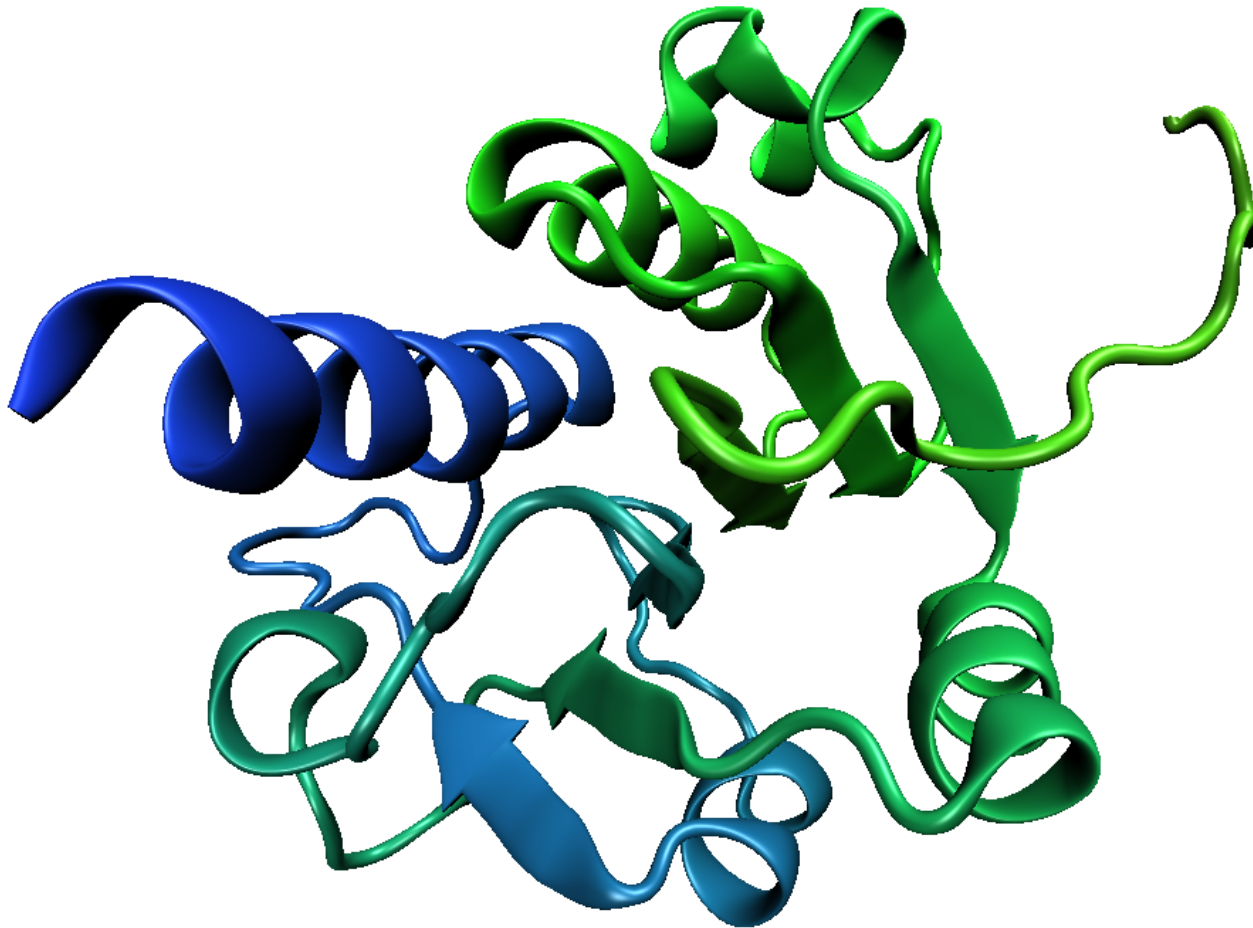
Klassifikation af proteiner

- Proteindatabasen PDB er testeksempler
- <http://knots.mit.edu/> Udregning af knuder i PDB
- <http://www.ploscompbiol.org/article/info:doi/10.1371/journal.pcbi.1000731>
- "A recently uncovered α -haloacid dehalogenase structure contains a knot with six crossings, a so-called Stevedore knot, in a projection onto a plane. The smallest protein knot is present in an as yet unclassified protein fragment that consists of only 92 amino acids."

Stevedore knude



Trekløver i protein "rygrad".



Wikipedia: Trefoil knot fold. "A deep trefoil knot in *Thermus thermophilus* RNA-methyltransferase domain (PDB ID 1IPA).

DNA krøller, klippes over,...

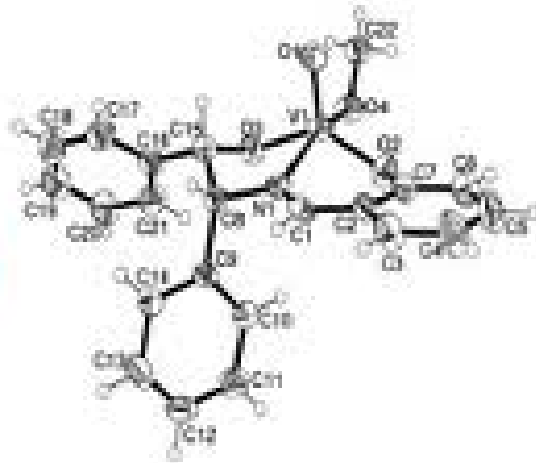
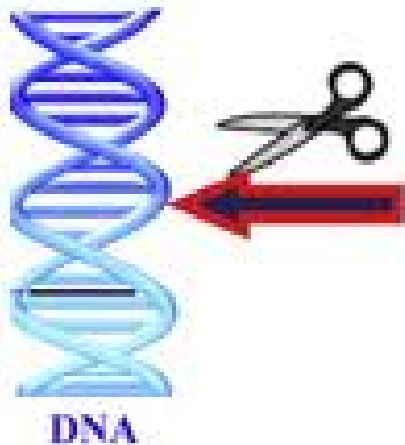
- <http://www2.imperial.ac.uk/~kav106/Oxford28Feb2011.pdf>
- <http://www.biochem.arizona.edu/classes/bioc461/Chapter27Notes.htm> Noter og slides om DNA
- Topoisomerase – enzymer, der klipper den ene streng og sætter sammen, så DNA "krøller mindre." DNA-ligase er en topoisomerase.

DNA

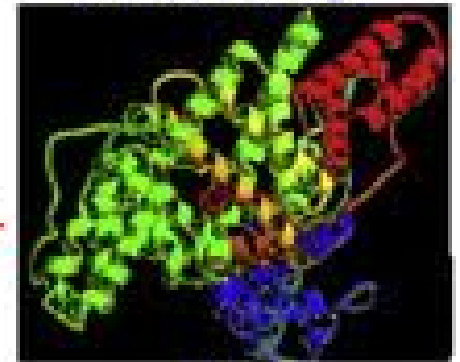
- Dobbelt helix
- Watson og Crick mente, strukturen var regulær – 36 grader drejning pr basepar.
- Drejning afhænger af baseparret 28-42 grader drejning.
- Derfor har DNA global struktur, som afhænger af mikrostrukturen.
- Interaktion med proteiner afhænger af 3D-strukturen

Enzymer klipper i DNA og limer sammen

DNA cleavage



Protein cleavage



BSA

Chiralitet

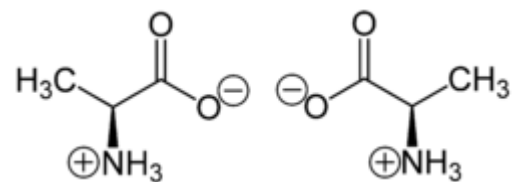
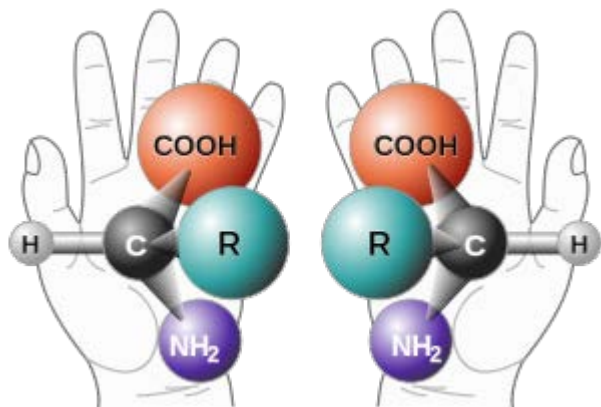
- Et objekt er chiralt, hvis der ikke er ækvivalent med sit spejlbillede
- Trekløveret er chiralt- forskellige jonespolynomier
- Ottetalsknuden er achiral



Ny forskning

- <http://www.crm.sns.it/event/207/>
- Biomatematik og bioinformatik er et voksende område.
- Andre relevante knudeegenskaber, invarianter, for DNA: vridning. De to strenge vrider om hinanden. DNA er en båndknode – ribbonknot.
- DTU matematik har forskning i proteinstruktur (Peter Røgen).

Chirale molekyler



S-alanin og R-alanin

Chiralitet i proteiner

- Der er fundet chiralitet i proteiner – trekløverknuden.
- Chiralitet giver forskellig drejning og dermed forskellig 3D-struktur – forskellige knuder.
- Spejlbilleder kan have forskellige egenskaber
- Chirale molekyler (enantiomerer) smager forskelligt, fordi smagsreceptorerne er chirale.

Knuder i fysik

- Historisk: Knuder i æteren.
- Nu strengteori.
- Knuder og 3-mangfoldigheder (3-dimensionale "flader")
Knodekomplementer.
- Knuder i lys <http://www.livescience.com/8012-twisted-physics-scientists-create-light-knots.html>
- Jones Polynomiet kommer fra kvantefeltteori
- Partiklers baner i rum-tid fletter sammen til braids.
- <http://physics.aps.org/articles/v4/10>

Fysik og knuder

- Meget langhåret fysik Ed Witten 2011 "Five-branes and knots."
- <http://ldtopology.wordpress.com/2011/01/20/news-flash-wittens-new-preprint/>
- Knuder har energi – jo mere knudret, jo mere energi kræves for at løse den op.
- Vortex knuder – i turbulens; i singulariteterne.
- Knuder i solens magnetfelt
http://science.nasa.gov/science-news/science-at-nasa/2001/ast15feb_1/

Knuder og fysik

- <http://blogs.vanderbilt.edu/research/2011/04/beyond-knot-theory/>
- Hvilke knuder dannes spontant på hvor lange stykker reb. Sandsynligheden afhænger af længden på rebet (naturligvis) og hvilke knuder, man ønsker – sandsynligheden aftager som funktion af krydsningstal og energi. Godt eksperiment. Put reb i en kasse og ryst det rundt. Tag et billede og analyser knudediagrammet.
- <http://www.pnas.org/content/104/42/16432.abstract> (artiklen om snorrysteriet)

Knuder og gymnasieelever

- Masser af matematik – klassifikation, invarianter, addition og primknuder, se Kenneth Hansen: Knuder, Systime.
- Eksperimenterende tilgang.
- Anvendelser i biologi – eksperimenter??
- Videnskabshistorie: Fra knuder i æteren til moderne bioinformatik – samme matematik, selvom fysik ikke har æterteori mere
- Fysik – nok vanskeligt. Braids, fletninger, optræder mange steder i (teoretisk) fysik. Anyoner er ”kvasipartikler” i kvantefysik – tror jeg nok...

<http://www.sciencedaily.com/releases/2010/11/101101102530.htm>

Fysikerne har muligvis fundet dem. De skal bruges til kvantecomputere.

Knuder og gymnasieelever

- Som formidling (– er prøvet i SRP) Skriv en populær artikel om knuder. I samarbejde med Dansk eller Mediefag.

Diverse links

- En god reference er Plus Magazine.
- <http://plus.maths.org/>
- Plus om knuder: <http://plus.maths.org/content/why-knot-knots-molecules-and-stick-numbers>
- Se også Plus' oversigter – Teacher packages <http://plus.maths.org/content/search/node/teacher%20package> Bl.a. om grafer.
- <http://nrich.maths.org/public/> er også et godt generelt site.
- <http://www.mathematics-in-europe.eu/> som Behrends henviste til.
- Kan man tysk er <http://www.mathematik.de/ger/index.php> også god at få forstand og ideer af.