

i Information Exam TFY4310 11 Mai 2022

Institutt for fysikk

Eksamensoppgave i TFY4310 Molekylær biofysikk

Eksamensdato: 11 mai 2022

Eksamenstid (fra-til): 09:00 – 13:00

Hjelpemiddelkode/Tillatte hjelpemidler: A / Alle hjelpemidler tillatt

Faglig kontakt under eksamen: Bjørn Torger Stokke

Tlf.: 73 59 34 34 / 924 920 27

Teknisk hjelp under eksamen: NTNU Orakel

Tlf: 73 59 16 00

Får du tekniske problemer underveis i eksamen, må du ta kontakt for teknisk hjelp snarest mulig, og senest innen eksamenstida løper ut/prøven stenger. Kommer du ikke gjennom umiddelbart, hold linja til du får svar.

ANNEN INFORMASJON

Ikke ha Inspera åpen i flere faner, eller vær pålogget på flere enheter, samtidig, da dette kan medføre feil med lagring/levering av besvarelsen din.

Skaff deg overblikk over oppgavesettet før du begynner på besvarelsen din.

Les oppgavene nøye, gjør dine egne antagelser og presiser i besvarelsen hvilke forutsetninger du har lagt til grunn i tolkning/avgrensing av oppgaven. Faglig kontaktperson kan kontaktes dersom du mener det er feil eller mangler i oppgavesettet.

Juks/plagiat: Eksamen skal være et individuelt, selvstendig arbeid. Det er tillatt å bruke hjelpemidler, men vær obs på at du må følge eventuelle anvisningen om kildehenvisninger under. Under eksamen er det ikke tillatt å kommunisere med andre personer om oppgaven eller å distribuere utkast til svar. Slik kommunikasjon er å anse som juks.

Alle besvarelser blir kontrollert for plagiat. [Du kan lese mer om juks og plagiering på eksamen her.](#)

Kildehenvisninger: Henvis til kilder du legger til grunn for besvarelsen i tilfelle du bruker kilder ut over de som er tilgjengelige fra Bb for emnet.

Varslinger: Hvis det oppstår behov for å gi beskjeder til kandidatene underveis i eksamen (f.eks. ved feil i oppgavesettet), vil dette bli gjort via varslinger i Inspera. Et varsel vil dukke opp som en dialogboks på skjermen i Inspera. Du kan finne igjen varselet ved å klikke på bjella øverst i høyre hjørne på skjermen. Det vil i tillegg bli sendt SMS til alle kandidater for å sikre at ingen går glipp av viktig informasjon. Ha mobiltelefonen din tilgjengelig.

Vekting av oppgavene: Det er angitt maksimalt antall oppnåelige poeng på hver oppgave i oppgavesettet.

BESVARE OG LEVERE

Besvare i Inspera: Hvis oppgavesettet inneholder oppgaver som *ikke* er av typen filopplasting, skal de besvares direkte i Inspera. I Inspera lagres svarene dine automatisk hvert 15. sekund.

NB! Klipp og lim fra andre programmer frarådes, da dette kan medføre at formatering og elementer (bilder, tabeller etc.) vil kunne gå tapt.

Filoplasting: Når du jobber i andre programmer fordi hele eller deler av besvarelsen din skal leveres som filvedlegg – husk å lagre besvarelsen din med jevne mellomrom.

Merk at alle filer må være lastet opp i besvarelsen før eksamenstida går ut.

Denne eksamen er satt opp med at det lastes opp inntil tre filer som inneholder alle besvarelsene som besvares på denne måten. Angi hvilken oppgave svarene dine er for. Formatet på disse foretrekkes å være pdf. Det er en satt opp tre "filopplastingsoppgaver" hvor du laster opp filen.

Det er lagt til **30 minutter** til ordinær eksamenstid for eventuell digitalisering av håndtegninger og opplasting av filer. Tilleggstida er forbeholdt innlevering og inngår i gjenstående eksamenstid som vises øverst til venstre på skjermen.

NB! Det er ditt eget ansvar å påse at du laster opp riktig(e) og intakt(e) fil(er). Kontroller filene du har lastet opp ved å klikke "Last ned" når du står i filopplastingsoppgaven. Alle filer kan fjernes og byttes ut så lenge prøven er åpen.

[Slik digitaliserer du eventuelle håndtegninger](#)

[Slik lagrer du dokumentet ditt som PDF](#)

[Slik fjerner du forfatterinformasjon fra filen\(e\) du skal levere](#)

Automatisk innlevering: Besvarelsen din leveres automatisk når eksamenstida er ute og prøven stenger, forutsatt at minst én oppgave er besvart. Dette skjer selv om du ikke har klikket «Lever og gå tilbake til Dashboard» på siste side i oppgavesettet. Du kan gjenåpne og redigere besvarelsen din så lenge prøven er åpen. Dersom ingen oppgaver er besvart ved prøveslutt, blir ikke besvarelsen din levert. Dette vil anses som "ikke møtt" til eksamen.

Trekk/avbrutt eksamen: Blir du syk under eksamen, eller av andre grunner ønsker å levere blankt/avbryte eksamen, gå til "hamburgermenyen" i øvre høyre hjørne og velg «Lever blankt». Dette kan ikke angres selv om prøven fremdeles er åpen.

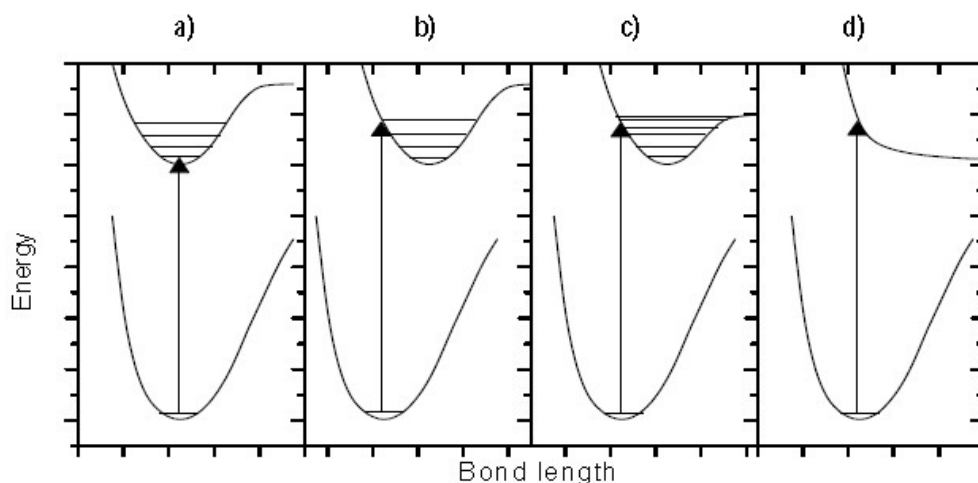
Tilgang til besvarelse: Du finner besvarelsen din i Arkiv etter at sluttida for eksamen er passert.

1 Oppgave 1

1. Gi en vurdering av om eksplisitt og implisitt representering av løsningsmiddel-molekyler i molekylære simulering er å foretrekke for modellering av organisering av proteiner som kan være integrert / transmembrane i cellemembraner.

Skriv svaret ditt her

2. Figuren under viser elektroniske transisjoner i to-atomig molekyl med ulike energinivåer i et energi diagram.



Identifiser underfigur(er) som viser elektroniske transisjoner som følger:

2i) til en tilstand som fører til dissosiering av molekylet

2ii) til en tilstand hvor bindingslengden i den eksiterte tilstand er større enn grunntilstanden

2iii) hvor intensiteten til transisjonen mellom 0-0 vibrasjonstilstander er størst.

Gi også en kortfattet begrunnelse.

Skriv ditt svar her

3. Rett eller galt: analyser utsagnet: Det er kun en elektronhale i hydrogenionet H_3O^+ i forhold til to elektronhaler i vannmolekylet

Skriv ditt svar her

4. Rett eller galt: vurder følgende påstand: Flory-Huggins teori angir at blanding av løsningsmiddel og polymer er mindre gunstig for lange (mange monomerer i hver polymerkjede) enn korte (færre monomerer i hver polymerkjede) polymerer.

Skriv ditt svar her

5. Rett eller galt: vurder følgende utsagn: Overlapp konsentrasjonen øker og skalerer med antall segmenter n i en polymer som $n^{-4/5}$ når polymeren overføres fra et godt løsningsmiddel til et ideelt løsningsmiddel.

Skriv ditt svar her

6. Begrunn følgende utsagn: En surfaktant med to hydrofobe karbonkjeder bundet til samme hydrofile hodegruppe har en større tendens til å bidra til flate amfifile aggregater enn surfaktant med samme hodegruppe og en hydrofob karbonkjede.

Skriv ditt svar her

Maks poeng: 20

2 Oppgave 2

Beregn elektrostatisk potensiell energi mellom to motsatt ladede punktladninger i en fysiologisk vandig løsning som inneholder 150 mM NaCl og 3 mM CaCl₂. Anta at de to punktladningen har følgende egenskaper:

Ladning 1: $Z_1 = 12 e$

Ladning 2: $Z_2 = -20 e$

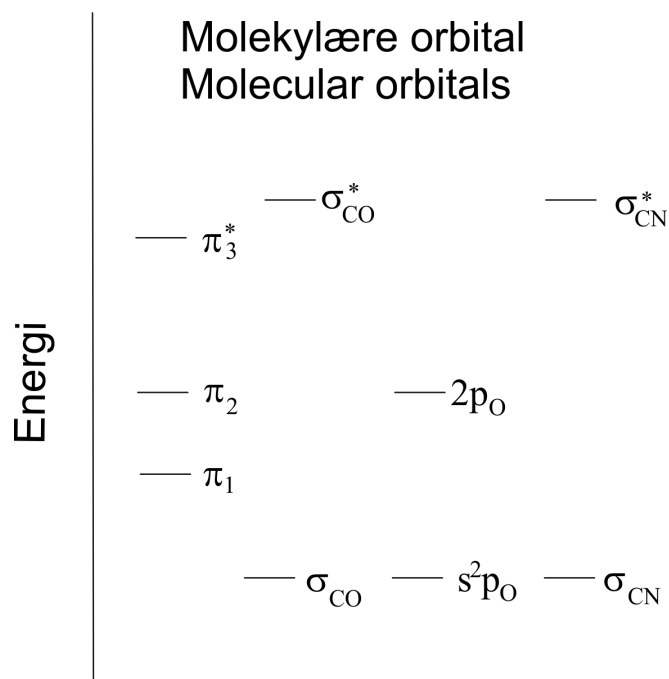
Anta at temperaturen er 20 °C og beregn denne energien når punktladningen er 4.8 nm fra hverandre.

Skriv ditt svar her

Maks poeng: 3

3 Oppgave 3

Amid gruppen er sentral i proteiner. Figuren under viser energinivåene til molekylære orbitaler som forekommer (eksperimentelt) i denne gruppen.



Figur. Energinivåer til molekylære orbital forekommende i amid gruppen.

Amid gruppen kan angis som $R_1CONR_2R_3$ hvor R (med indeks) beskriver et atom som inngår med enkeltbinding til C for R_1 og N for R_2 og R_3 . Er de molekylære orbitalene vist i figuren ulikt det som forventes basert på atomære orbital som utgangspunkt? (begrunn svaret). Identifiser overgang fra elektronisk grunntilstand til den første elektronisk eksiterte tilstanden i amid gruppen

Skriv ditt svar her eller lever på opplastet ark

Format



B

I

U

\times_2

\times^2

\int_x



Words: 0

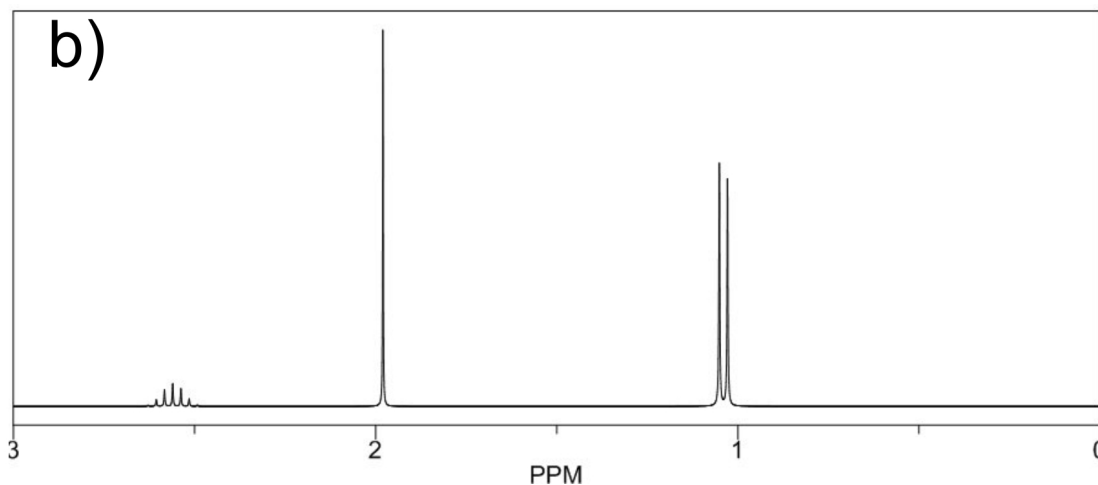
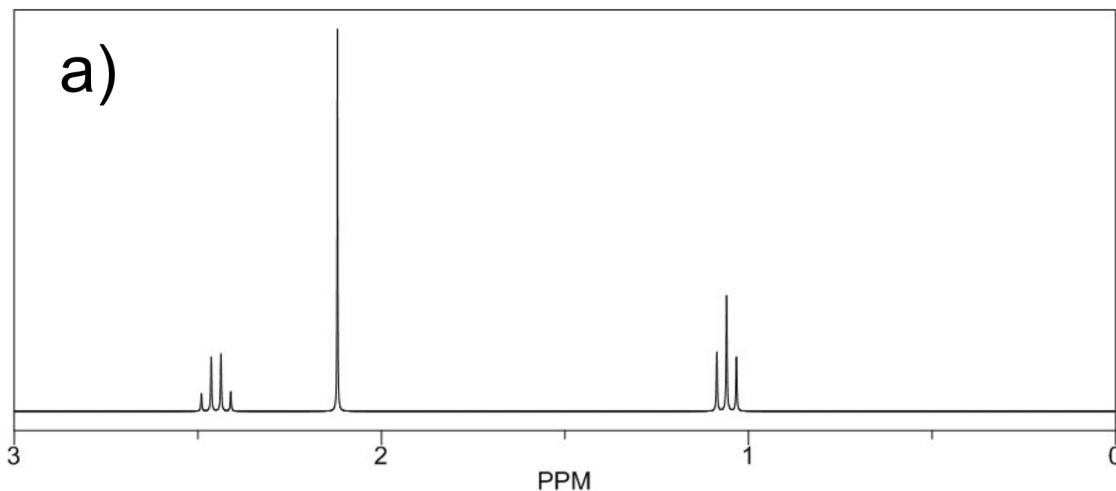
Maks poeng: 6

4 Oppgave 4

a). Beskriv hva som menes med spin-gitter og spin-spin relaksasjon i NMR spektrosopi. Beskriv hva som menes med en 90° rf puls som brukes for i et proton NMR eksperiment, og hvordan netto magnetisering i prøven påvirkes som følge av denne pulsen.

Skriv ditt svar her

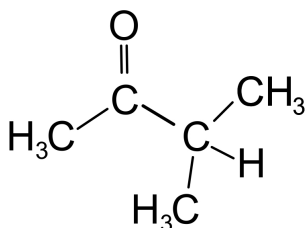
b). Figur 1 viser to ^1H - NMR spektra.



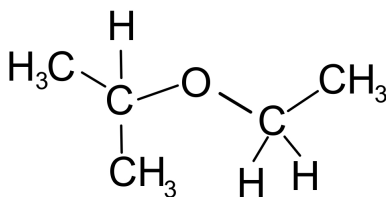
Figur 1. To ^1H - NMR spektra.

Figur 2 viser tre ulike organiske molekyler, angitt i), ii) og iii).

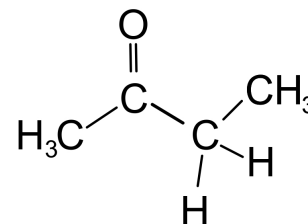
i)



ii)



iii)



Figur 2. Tre ulike organiske molekyler.

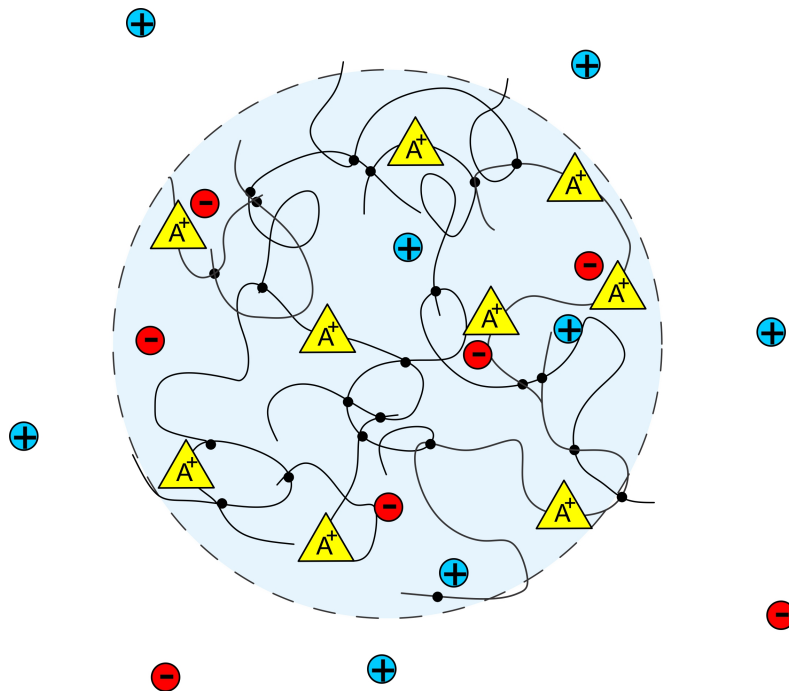
Analyser de to ^1H -NMR spektra i figur 1 med utgangspunkt i de tre mulig molekylene vist i figur 2, og identifiser hvilket molekyl som er karakterisert i de to ^1H -NMR spektra i figur 1.

Skriv ditt svar her eller på opplastet fil.

Maks poeng: 9

5 Oppgave 5

Figur 1 viser en skjematisk illustrasjon av en hydrogel med ladede gruppe på polymerkjedene i et overskudd av volum av vandig løsningsmiddel.

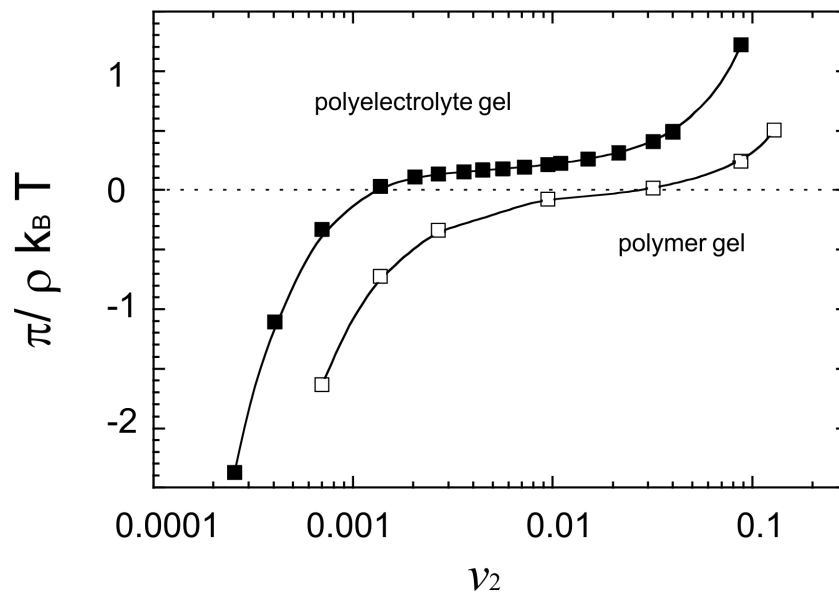


Figur 1. Skjematisk skisse av hydrogel (i området farget lyseblått) med ladede kjemiske grupper (gule trekantar) i et overskuddsvolum av vann. Blå og rød sirkler med + og - tegn angir positivt og negativt ladede ioner (monovalente).

a) Vurder helheten i Figur 1 og angi om det er noen mangler i skissen (med begrunnelse). Beskriv prinsippet for likevektsvolum av en ladet hydrogel i et overskudd av vann og beskriv prinsippene for hvordan likevekt oppnås fra en tilstand utenfor likevektsvolum.

Skriv ditt svar her eller/og på ark du laster opp som fil

Figur 2 viser beregnet redusert osmotisk trykk som funksjon av volumfraksjon av polymer, v_2 i to typer hydrogeler. Den ene har uladet polymer (merket "polymer gel") og den andre har en polymer som har ladede grupper (merket "polyelectrolyte gel").



Figur 2. Redusert osmotisk trykk som funksjon av polymer volumfraksjon til to typer hydrogeler.

Anta at polymerene i de to hydrogelene er kryssbundet ved volumfraksjon $v_2 = 0.1$. Denne volumfraksjonen svarer til ustrekk tilstand av polymerkjedene.

Beskriv likevektsbetingelsen for svelletilstand for hydrogeler og avled et numerisk estimat av volumfraksjon av polymerene for de to hydrogelene ved likevekt svelletilstand basert på data i figur 2. Beregn hvor mye polymerkjedene er strekt ved likevekt svelletilstand ved uttrykket:

$$\frac{\langle R_{ee}^2 \rangle^{1/2}}{\langle R_{ee}^2 \rangle_0^{1/2}}$$

for de to type hydrogelene. Indeks 0 i uttrykket over svarer til tilstanden der kryssbindingene ble introdusert. Vurder om en ideell Gaussisk polymer model med $n=15$ segmenter anvendt på polymerene (mellom kryssbindingspunktene) ved kryssbindingstilstanden kan brukes for de aktuelle tilfellene.

Skriv ditt svar her eller skriv på ark som lastes opp

Maks poeng: 9

6 Oppgave 6

Et protein blir sentrifugert ved 12 000 rpm til likevekt ved 4°C i en fortennet vandig løsning. Netto absorbans ved 280 nm til proteinløsningen er bestemt i prøvecellen som funksjon av horisontal avstand fra rotasjonsaksen som følger:

r(cm)	4.00	4.05	4.10	4.15	4.20	4.25	4.30	4.35
A(280 nm)	0.161	0.195	0.237	0.290	0.354	0.433	0.532	0.655

Anta at det partielle spesifikke volumet til proteinet er 0.740 ml/g.

Beregn molekylvekten (i enhet g/mol) til proteinet.

Skriv ditt svar her

Maks poeng: 6

7 Oppgave 7

En mulig prosedyre for å renske opp en løsning med to ulike makromolekyler / partikler.

Anta følgende instrumentering er tilgjengelig: En sentrifuge som kun kan opereres med en rotasjonshastighet 20000 rpm eller 40000 rpm (ved romtemperatur 20 °C). Til denne sentrifuger er det kun tilgjengelig en rotor, hvor prøvecellen er i horisontal avstanden mellom 5 og 10 cm, for henholdsvis menisk og bunn av prøvecellen, begge avstander målt fra rotoraksen. Utgangspunkt her er en løsning som inneholder to makromolekyler med samme konsentrasjon.

Følgende molekylære parametre er kjent for de to makromolekylene:

MolA har sedimentasjonskoeffesient $s_A = 4.31 \text{ S}$ og diffusjonskonstant $D_A = 6.3 \times 10^{-7} \text{ cm}^2/\text{s}$

MolB har sedimentasjonskoeffesient $s_B = 132 \text{ S}$ og diffusjonskonstant $D_B = 1.15 \times 10^{-7} \text{ cm}^2/\text{s}$

Du skal finne fram til en foretrukket bruk av dette utstyret for å behandle denne løsningen slik at du får mest mulig av det ene makromolekylet tilgjengelig uten at det er «forurenset» av det andre makromolekylet.

a) Anta at diffusjon av makromolekylene kan ses bort fra. Foreslå en prosedyre basert på sentrifugen som er beskrevet slik at prosedyren gir en løsning hvor du har mest mulig av det ene makromokylet og minst mulig av det andre. Forslaget til prosedyre(r) skal begrunnes. Hvilken av de to rotor hastighetene vil du anbefale for dette formålet?

Skriv ditt svar her

b. Vurder hva som er effekten av diffusjon av makromolekylene på foreslått prosedyre(r) i oppgave a) og om det fører til endret forslag til prosedyre.

Skriv ditt svar her

Maks poeng: 12

8 Oppgave 8

Et protein med ukjent geometri/konformasjon er karakterisert ved lav-vinkel røntgen spredning og ved dynamisk lysspredning. Oppgaven går ut på å analysere data fra disse to eksperimentelle teknikkene, og vurdere resultatene i sammenheng for å komme fram til mulig type geometri/konformasjon til det ukjente proteinet. Det antas at dette proteinet forekommer kun med en molekylvekt (monodispers). Alle oppgitte data er ved 20 °C.

Det er benyttet en løsning med lav konsentrasjon av proteinet ved dataopptak ved lav-vinkel røntgen spredning med en bølgelengde $\lambda = 0.16$ nm, og følgende data er oppnådd:

Spredvinkel θ (mRadianer)	1.0	2.0	3.0	4.0	5.0
$I(\theta)/I(\theta = 0)$	0.9887	0.9554	0.9025	0.8332	0.7520

a) Beregn en parameter for størrelse til det aktuelle proteinet basert på data fra lavvinkel spredning,

Skriv svar på ark som lastes opp , ev gi videre opplysninger her

Det er også benyttet en løsning lav konsentrasjon av proteinet ved dynamisk lysspredning. I dynamisk lysspredningsoppsettet er det benyttet $\lambda = 633$ nm (i løsningen), og spredvinkelen er 45 grader.

Følgende data er observert for intensitetskorrelasjonsfunksjonen:

$\tau(\mu s)$	10	20	30	40	60	80	100	200
$g^{(2)}$	1.961	1.923	1.887	1.852	1.787	1.726	1.679	1.449

b) Beregn en parameter for størrelse til det samme proteinet basert på de gitte dynamisk lysspredningsdata

Skriv svar på ark som lastes opp , ev gi videre opplysninger her

c) Vurder de to parameterne for størrelse til proteinet i sammenheng, diskuter ut fra det hva som kan være en mulig konformasjon og begrunn dette.

Skriv svar på ark som lastes opp , ev gi videre opplysninger her

Maks poeng: 15

9 Filoplasting

Dette er stedet du laster opp en fil som viser din besvarelse.


Kombiner alt du skal laste opp ved din besvarelse av oppgavene i en fil. Den skal helst være i pdf format.

Husk å angi hvilke oppgaver du besvarer i de ulike delene av filen du laster opp.



Last opp filen her. Maks én fil.

Alle filtyper er tillatt. Maksimal filstørrelse er **50 GB**.

 Velg fil for opplasting

Maks poeng: 0

10 Filoplasting 2

Dette er ett ytterligere sted du laster opp en fil som viser din besvarelse om du får tekniske problemer.


Kombiner alt du skal laste opp ved din besvarelse av oppgavene i en fil. Den skal helst være i pdf format.

Husk å angi hvilke oppgaver du besvarer i de ulike delene av filen du laster opp.



Last opp filen her. Maks én fil.

Alle filtyper er tillatt. Maksimal filstørrelse er **50 GB**.

 Velg fil for opplasting

Maks poeng: 0

11 Fil opplasting 3

Dette er ett ytterligere sted du kan laster opp en fil som viser din besvarelse.


Kombiner alt du skal laste opp ved din besvarelse av oppgavene i en fil. Den skal helst være i pdf format.

Husk å angi hvilke oppgaver du besvarer i de ulike delene av filen du laster opp.



Last opp filen her. Maks én fil.

Alle filtyper er tillatt. Maksimal filstørrelse er **50 GB**.

 Velg fil for opplasting

Maks poeng: 0