

# STELLINGEN

behorende bij het proefschrift van Marcel Swart

1. Bij het evalueren van het nut van de extreem lange simulaties (160-800 miljoen Monte Carlo stappen) van Jorgensen et al. met het TIP4P water model moet in gedachten worden gehouden dat binnen twee jaar na publicatie de auteurs met een verbeterd water model (TIP5P) kwamen.

*W.L. Jorgensen, C. Jenson, J. Comput. Chem. 19 (1998) 1179-1186*

*M.W. Mahoney, W.L. Jorgensen, J. Chem. Phys. 112 (2000) 8910-8922*

2. Het is zorgwekkend dat de redox toestand van een metaaleiwit kan veranderen bij de bepaling van de kristalstructuur.

*G.I. Berghlund, G.H. Carlsson, A.T. Smith, H. Szöke, A. Henriksen and J. Hajdu, Nature 417 (2002) 463-468*

3. De structuur van het geactiveerde intermediair (*Compound I*) in de katalytische cyclus van cytochrome P450 is nog steeds niet gelokaliseerd, ondanks de poging op atomaire resolutie.

*I. Schlichting, J. Berendzen, K. Chu, A.M. Stock, S.A. Maves, D.E. Benson, R.M. Sweet, D. Ringe, G.A. Petsko and S.G. Sligar, Science 287 (2000) 1615-1622*

4. Het resultaat van het uitvoeren van moleculaire dynamica simulaties aan metaaleiwitten is sterk afhankelijk van het gebruikte computerprogramma en de connecties met de ontwikkelaars ervan.

5. Bij het berekenen van de excitatie-energieën van het actieve centrum van een eiwit is het meenemen van de eiwitomgeving in de berekening van doorslaggevende betekenis.

*Hoofdstuk acht van dit proefschrift*

6. Het gebruiken van water als molecuul om een computerprogramma te testen is door de snelheid van de huidige computers niet relevant meer.

7. De geometrie van de coördinatie van Met121 met koper in azurine wordt bepaald door de eiwitomgeving.

*Hoofdstuk 6.3 en 9 van dit proefschrift*

8. Geen of negatief resultaat is óók resultaat, en het publiceren ervan is relevanter voor de wetenschap dan het alleen maar rapporteren van 'succes'-verhalen.
9. Rechtlĳnig denken heeft alleen zin in een één-dimensionale wereld.
10. Het huidige stelsel van hondenbelastingen werkt niet en zou vervangen moeten worden door vergunningen, waarbij wordt gekeken naar de leefomstandigheden van de hond én de geluidsoverlast voor de bureu. Het verdient daarbij de aanbeveling dat de eerste zo hoog en de tweede zo laag mogelijk is, in tegenstelling tot de huidige situatie waarin het vaak precies omgekeerd is.
11. Camus' beschrijving van een absurde wereld is door de gebeurtenissen van 11 september weer actueel geworden.  
*Albert Camus – De myte van Sisyfus*
12. Een goed idee klopt voor het in je hoofd opkomt.  
*Loesje scheurkalender 2001; hoofdstuk 9.1 van dit proefschrift*

Groningen, 10 september 2002.