



Übungsblatt 8 Abgabe bis 03.07.2017 vor der Übung

Vorname, Name:

1. Erläutern Sie warum a) Ionen in wässriger Lösung energetisch sehr viel günstiger sind als in der Gasphase, und b) wieso es dann schwerlösliche Salze gibt. (20 Punkte)

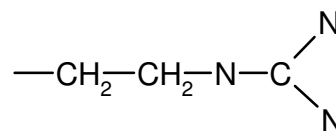
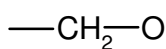
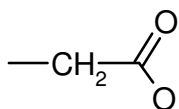
2. Geben Sie die jeweils richtige Bezeichnung zu den Definitionen an: (15 Punkte)

- a) Transfer aus der Gasphase in ein Lösungsmittel
- b) Transfer aus der festen Phase in ein Lösungsmittel
- c) Übergang aus der festen in die flüssige Phase
- d) Übergang aus der festen Phase in die Gasphase
- e) Übergang aus der Gasphase in die flüssige Phase

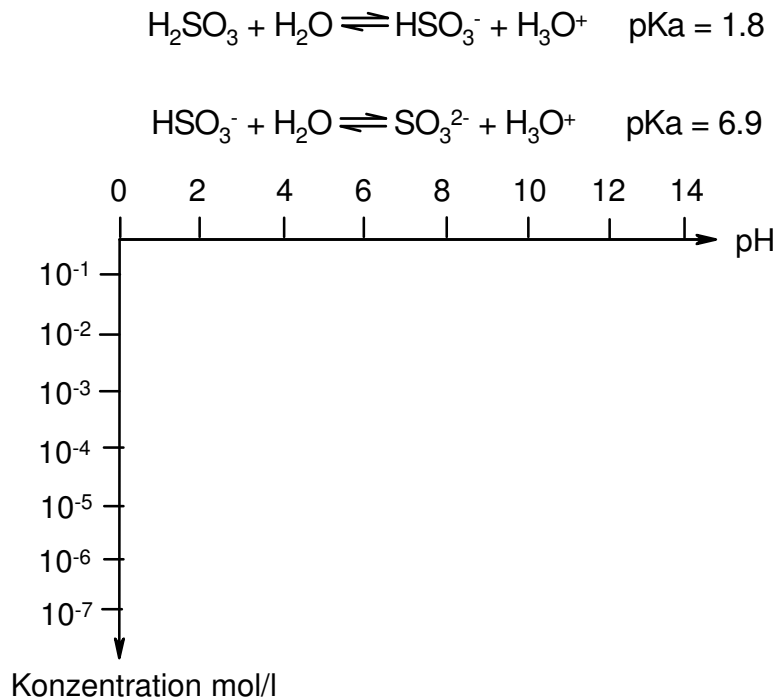
3. Berechnen Sie die Ionenstärke I einer 0.1 molaren H_3PO_4 Lösung anhand der Formel

$I = \frac{1}{2} \sum_i c_i z_i^2$ mit der Konzentration c_i und der Ladungszahl z_i der Ionen. Hinweis: H_3PO_4 ist als vollständig dissoziiert anzunehmen. (10 Punkte)

4. Der Protonierungszustand folgender Aminosäureseitenketten bei $\text{pH}=7.4$ ist gefragt. Zeichnen Sie die notwendigen Protonen ein. (15 Punkte)



5. Es liegt eine 0.1 molare Lösung von H_2SO_3 vor. Zeichnen Sie in die untere Grafik den Konzentrationsverlauf der auftretenden Ionen und anderer Komponenten (H_3O^+ , OH^- , neutrale Verbindungen) zwischen $\text{pH}=0$ und $\text{pH}=14$ ein. (20 Punkte)



6. a) Kreuzen Sie an, für welche der folgenden Wechselwirkungen entsprechende Energieterme in quantenmechanischen (QM) Methoden bzw. in Molekülmechanischen Kraftfeldern (MM) vorhanden sind. (10 Punkte)

	MM	QM
Elektrostatische Wechselwirkungen zwischen den Atomzentren	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
Elektrostatische Wechselwirkungen zwischen den Elektronen	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
Elektrostatische Wechselwirkungen zwischen Atomzentren und Elektronen	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
Van der Waals Wechselwirkungen	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
Wasserstoffbrücken	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>

b) welche zusätzliche(n) Energieterm(e) im Vergleich zu einem Kraftfeld benötigt man für eine energiebasierte Scoringfunktion beim Docking? (10 Punkte)