



## Übungsblatt 9

**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)

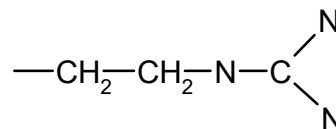
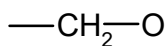
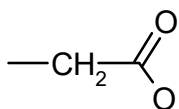
2. Geben Sie die jeweils richtige Bezeichnung zu den Definitionen an: (15 Punkte)

- 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

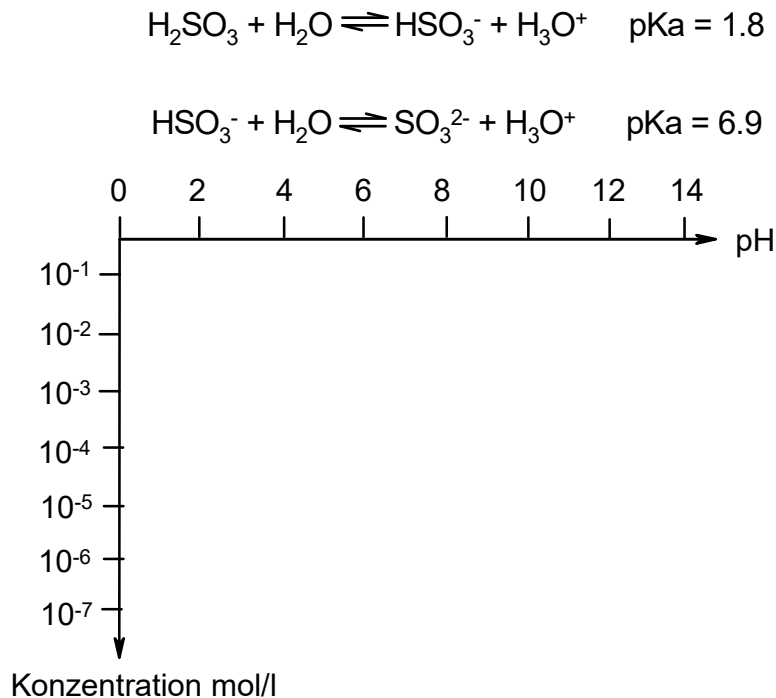
3. Berechnen Sie die Ionenstärke  $I$  einer 0.1 molaren  $\text{H}_3\text{PO}_4$  Lösung anhand der Formel

$I = \frac{1}{2} \sum_i c_i z_i^2$  mit der Konzentration  $c_i$  und der Ladungszahl  $z_i$  der Ionen. Hinweis:  $\text{H}_3\text{PO}_4$  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  $\text{H}_2\text{SO}_3$  vor. Zeichnen Sie in die untere Grafik den Konzentrationsverlauf der neutralen Verbindungen und der Ionen sowie von  $\text{H}_3\text{O}^+$  und  $\text{OH}^-$  zwischen  $\text{pH}=0$  und  $\text{pH}=14$  ein. (20 Punkte)



6. Welche zusätzliche(n) Energieterm(e) im Vergleich zu einem Kraftfeld benötigt man für eine energiebasierte Scoringfunktion beim Docking? (12 Punkte)

7. Die gemäß der Born Formel berechnete Solvatationsenergie wird hauptsächlich durch die Ladung  $q$  und den cavity Radius  $a$  bestimmt. (8 Punkte)

Wie verändert sich  $\Delta G$  wenn man die Ladung verdoppelt?

- a)  $\Delta G$  verdoppelt sich
- b)  $\Delta G$  vervierfacht sich

$$\Delta G_{\text{estat}} = -\frac{q^2}{2a} \left( 1 - \frac{1}{\epsilon} \right)$$

Wie verändert sich  $\Delta G$  wenn man den Radius verdoppelt?

- a)  $\Delta G$  geht auf  $\frac{1}{4}$  seines Wertes zurück
- b)  $\Delta G$  halbiert sich