



Übungsblatt 3 Abgabe bis 16.05.2022 vor der Übung

Vorname, Name:

Matrikelnummer:

1. Vergleichen Sie die elektrostatische Anziehung zwischen einem Na^+ und einem Cl^- Ion in Wasser ($\epsilon_r = 78$), im Vakuum ($\epsilon_r = 1$) und in einer Zellmembran ($\epsilon_r = 4$), ohne diese explizit auszurechnen. Ordnen Sie die Medien nach der Attraktivität des zugehörigen Potentials (das mit der stärksten Anziehung zuerst). (10 Punkte)

$$E = \sum_{i=1}^N \sum_{j>i}^N \frac{q_i q_j}{4\pi \epsilon_o \epsilon_r r_{ij}}$$

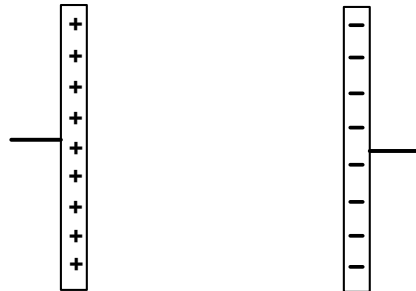
2. Gegeben sei die Funktion $g(x,y) = (x - y)^2 + 1/10 (x + y - 10)^2$

a) Bilden Sie die partiellen Ableitungen (= 1.Ableitungen) $\frac{\partial g}{\partial x}$ und $\frac{\partial g}{\partial y}$

Zeigen Sie, daß die gemischten Ableitungen (= 2.Ableitung) $\frac{\partial g}{\partial x \partial y}$ und $\frac{\partial g}{\partial y \partial x}$ gleich sind.

b) Berechnen Sie das Minimum von $g(x,y)$. Tip: Ermitteln Sie y in Abhängigkeit von x aus den ersten Ableitungen. Welchen Wert hat $g(x,y)$ und die 2. Ableitung am Minimum? (20 Punkte)

3. Zeichnen Sie ein, wie sich folgende Moleküle und Ionen im elektrischen Feld zwischen den beiden Elektroden ausrichten: H-F, C=O, H₂O, Na⁺, Cl⁻, PO₄³⁻ (30 Punkte)



4. Plotten Sie die Verteilung der Bindungslängen zwischen den Calpha und Cbeta Atomen (CA-CB Abstände) aus den pdb Dateien 6Q49.pdb und 1GIH.pdb.

Berücksichtigen Sie alle Aminosäuren außer Glycin und nur die Zeilen die „ATOM“ Einträge haben. Bei 6Q49.pdb treten bei einigen Residuen alternative Konformationen auf. Werten Sie dabei nur die mit „A“ in Spalte 17.

Tipp: Erstellen Sie ein Histogramm mit bins im Abstand von jeweils 0.005 Angstrom zwischen 1.460 und 1.580 Angstrom.

Der ideale Bindungsabstand für eine solche C-C Bindung liegt bei 1.54 Angstrom.

Wie unterscheiden sich Mittelwert und Standardabweichung bei diesen beiden pdb Dateien?

(40 Punkte)