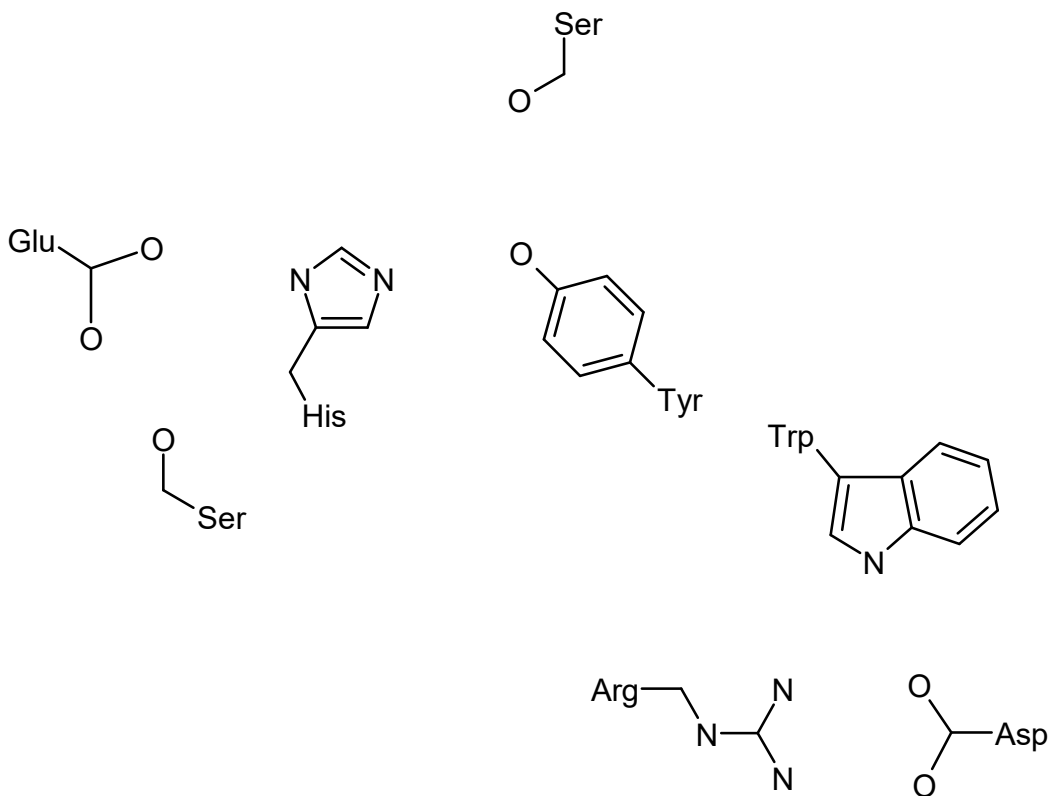




Übungsblatt 9 Abgabe bis 04.07.2022 vor der Übung

Vorname, Name:

1. Zeichnen Sie im folgenden Proteinausschnitt die fehlenden polaren H-Atome ein, sowie die daraus resultierenden Wasserstoffbrücken. Es herrscht ein Umgebungs pH = 7. (40 Punkte)



2. Warum ist die Wellenfunktion für sich genommen keine physikalische Observable?
(kurze Begründung) (10 Punkte)

3. Kreuzen Sie an, für welche der folgenden Wechselwirkungen entsprechende Energierterme 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"/>

4. Skizzieren Sie das Energieprofil von 1,2-Dichloro-Ethan für die Rotation um die zentrale C-C Bindung. Die van der Waals Radien sind: Wasserstoff: 1.20 Å, Kohlenstoff: 1.70 Å, Chlor: 1.75 Å (40 Punkte)

