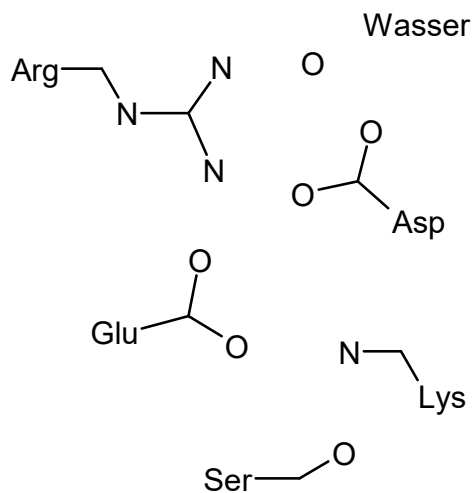




**Übungsblatt 9** Abgabe bis 03.07.2023 vor der Übung

**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. (20 Punkte)



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

3. Welche zusätzlichen Energie/Entropieterme im Vergleich zu einem Kraftfeld benötigt man für eine energiebasierte Scoringfunktion beim Docking? (10 Punkte)

4. 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"/>

5. Das Photosynthetische Reaktionszentrum des Purpurbakteriums *Rhodobacter sphaeroides* erzeuge bei Belichtung von 100 absorbierten Photonen pro Zeiteinheit 48 Moleküle reduziertes Quinon. Zur Reduktion eines Quinons sind zwei Elektronen bzw. Photonen notwendig. Berechnen Sie die Quantenausbeute (siehe Vorlesung 9, Formel auf S.19). (10 Punkte)

6. Skizzieren Sie das Energieprofil von 1-Bromo-2-Chloro-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, Brom 1.85 Å (40 Punkte)

