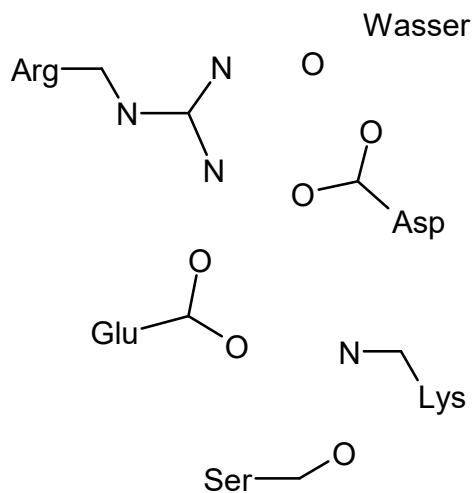


Übungsblatt 10 Abgabe bis 07.07.2025 vor der Übung

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 Energieteile in quantenmechanischen (QM) Methoden bzw. in Molekülmechanischen Kraftfeldern (MM) vorhanden sind. (10 Punkte)

	MM	QM
Elektrostatische Wechselwirkungen zwischen den Atomzentren	☐	☐
Elektrostatische Wechselwirkungen zwischen den Elektronen	☐	☐
Elektrostatische Wechselwirkungen zwischen Atomzentren und Elektronen	☐	☐
Van der Waals Wechselwirkungen	☐	☐
Wasserstoffbrücken	☐	☐

5. Das Photosynthetische Reaktionszentrum des Purpurbakteriums *Rhodobacter sphaeroides* erzeugt 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 10, 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)

