

**Probeklausur zur Vorlesung
Einführung in die Supramolekulare Chemie**

Name: Vorname:

Matrikelnummer: Semesterzahl:

Studienfach:

Bitte beachten Sie:

- Prüfen Sie direkt nach Erhalt, ob dieses Exemplar alle zehn (10) Fragen enthält. Schreiben Sie auf alle Seiten oben rechts Ihren Namen hin.
- Lesen Sie alle Fragen zuerst in Ruhe durch und beginnen Sie dann zuerst mit den Fragen, die Sie direkt beantworten können.
- Schreiben Sie Ihre Lösungen bitte nur auf die dazu vorgesehenen Stellen dieser Klausur. Wenn Sie mehr Platz benötigen, dann benutzen Sie die freien Rückseiten. **Schmierblätter oder zusätzliche Zettel können nicht berücksichtigt werden!**
- Schreiben Sie nicht mit Bleistiften o.ä. sondern verwenden Sie einen Kugelschreiber oder Füller.

VIEL ERFOLG

Die Klausur ist bei einer Mindestanzahl von 50 Punkten bestanden.

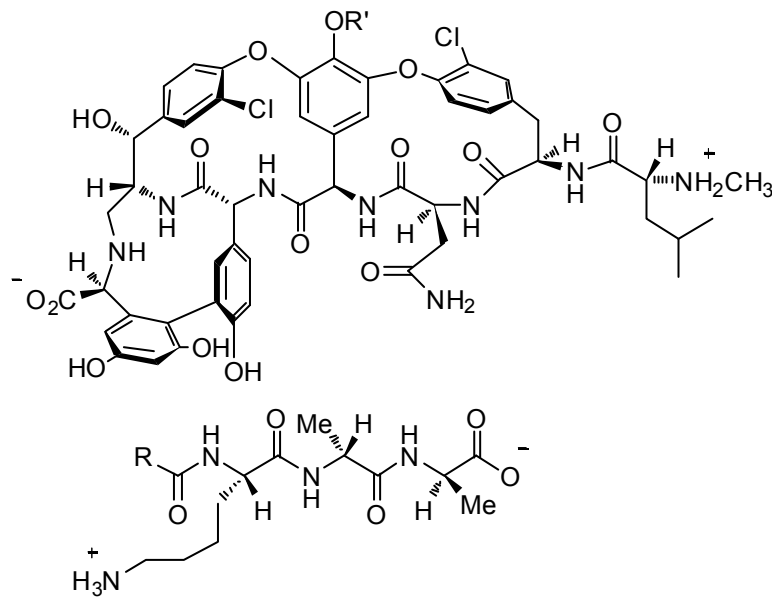
Auswertung

Aufgabe	1	2	3	4	5	6	7	8	9	Summe
max. Punkte										
erreichte Punkte										

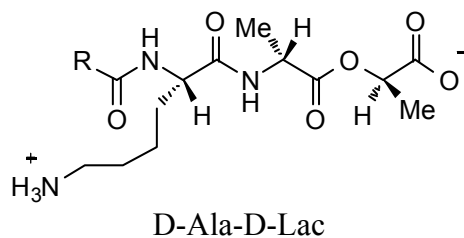
Name: _____

Aufgabe 1:

Nachfolgend ist das Peptidantibiotikum Vancomycin gezeigt und sein Substrat, die Dipeptidsequenz D-Ala-D-Ala. Die beiden bilden einen sehr stabilen Komplex mit einer Assoziationskonstante von ca. $K = 10^5 \text{ M}^{-1}$. Identifizieren Sie mindestens drei verschiedene Arten von nichtkovalenten Wechselwirkungen, die für die Komplexbildung wichtig sind.



In den letzten Jahren kommt es vermehrt zu Resistenzen gegenüber Vancomycin, bei denen die Bakterien anstelle der Peptidsequenz D-Ala-D-Ala das Depsipeptid D-Ala-D-Lac in ihre Zellwand einbauen. Erläutern Sie kurz, warum dadurch die Affinität von Vancomycin um den Faktor 1000 sinkt.



Name: _____

Aufgabe 2:

Geben Sie die Abstandsabhängigkeit der Energie der nachfolgend aufgeführten nichtkovalenten Wechselwirkungen in der Form $E \sim r^n$ an

Ion – Ion

Ion – Dipol

Dipol – Dipol

Van der Waals

Mit welcher Formel bzw. Gesetzmäßigkeit lässt sich die Wechselwirkungsenergie zweier Ladungen quantitativ beschreiben? Geben Sie die Formel an.

Was ist ein elektrischer Dipol? Geben Sie die Definition eines Dipols am Beispiel des HCl Moleküls an.

Name: _____

Aufgabe 3:

Wasserstoffbrücken gehörten lange Zeit zu den wichtigsten nichtkovalenten Wechselwirkungen. Erläutern Sie kurz an einem selbstgewählten Beispiel, was eine H-Brücke ist und wieso diese lediglich in unpolaren organischen Lösemitteln von Bedeutung sind aber z.B. nicht in wässriger Lösung.

Erläutern Sie kurz, wieso in der nachfolgend gezeigten Series die Stabilität der Komplexe um mehr als zwei Größenordnung abnimmt.

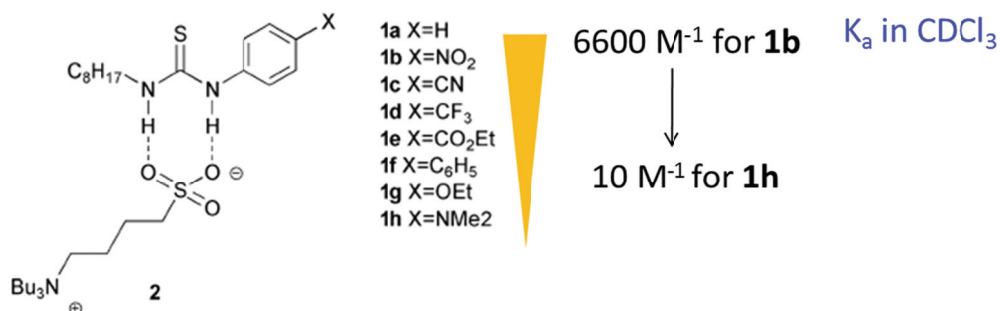


Fig. 2 Urea-sulfonate dyad studied by Wilcox and co-workers.

Name: _____

Aufgabe 4:

Die Interaktion von Aromaten (π -Stacking) ist ebenfalls eine wichtige nichtkovalente Wechselwirkung. Erläutern Sie mit Hilfe des Sanders-Hunter-Modells qualitativ, welche bevorzugten Geometrien Sie für eine stabilisierende Wechselwirkung von zwei Benzolmolekülen erwarten.

Name: _____

Aufgabe 5:

Die Faltung von Proteinen wird u.a. maßgeblich vom sogenannten hydrophoben Effekt gesteuert, der dafür verantwortlich ist, dass unpolare Seitenketten bevorzugt ins Innere eines globulären Proteins orientiert werden. Erläutern Sie kurz am Beispiel von zwei Hexan-Molekülen, wieso sich diese in Wasser zusammenlagern.

Name: _____

Aufgabe 6:

Beschreiben Sie quantitativ die Komplexbildung zwischen einem Wirt W und einem Gast G unter Bildung eines 1:2-Komplexes WG_2 . Geben Sie hierfür die Definition der Komplexassoziations- und -dissoziationskonstanten und deren jeweilige Einheit an. Geben Sie ebenfalls die Assoziationskonstanten für die schrittweise Bildung des 1:1- und des 1:2-Komplexes an. Wie hängen diese Konstanten mit der Gesamtassoziationskonstante zusammen?

Name: _____

Aufgabe 7:

Was versteht man unter einem Job-Plot? Wozu dient er und was wird dabei allgemein gegeneinander aufgetragen? Skizzieren Sie einen Job-Plot für einen 1:1 und einen 1:3-Komplex (Wirt:Gast).

Zwei gängige Methoden zur Bestimmung eines Job-Plots sind die UV/Vis- und die NMR-Spektroskopie. Welche konkrete physikalische Messgröße wird dabei jeweils auf der y-Achse des Job-Plots aufgetragen?

Name: _____

Aufgabe 8:

Leiten Sie unter der Name, dass $[G] = [G]_t$ gilt für eine UV/Vis-Titration einen Zusammenhang zwischen der beobachteten Messgröße A_{obs} und der Bindungskonstante K ab, indem Sie zeigen, dass unter dieser Bedingung der nachfolgende Zusammenhang gilt:

$$A_{\text{obs}} = \epsilon_h [H]_t + \epsilon_g [G]_t + \Delta\epsilon \cdot [H]_t \cdot \frac{K \cdot [G]_t}{1 + K \cdot [G]_t}$$

Früher hat man häufig linearisierte Formen der Bindungsisothermen zur quantitativen Auswertung verwendet. Ist diese Art der Datenauswertung völlig äquivalent zur direkt Auswertung der Bindungsisotherme mittels nicht-linearer Kurvendiskussion? Welche Probleme treten gegebenenfalls hierbei auf?

Name: _____

Aufgabe 9:

Ein Rezeptor besitzt zwei identische Bindungsstelle A1 und A2. Die Komplexbildung findet schrittweise statt, wobei man für die Bildung des 1:1-Komplexes eine Assoziationskonstante von $K_1 = 1000 \text{ M}^{-1}$ misst und für die Bildung des 1:2-Komplexes aus dem 1:1-Komplex eine von $K_2 = 500 \text{ M}^{-1}$. Handelt es sich Ihrer Meinung nach um einen kooperativen oder nicht-kooperativen Bindungsvorgang? Kurze Begründung?

Skizzieren Sie schematisch eine Bindungsisotherme für die Bindung von n Gästen an einen Rezeptor mit n -Bindungsstellen für a) einen nicht-kooperativen und b) einen ausgeprägt hoch-kooperativen Vorgang. Wie verändert sich die Bindungsisotherme, wenn n gegen unendlich geht?

Viel Erfolg