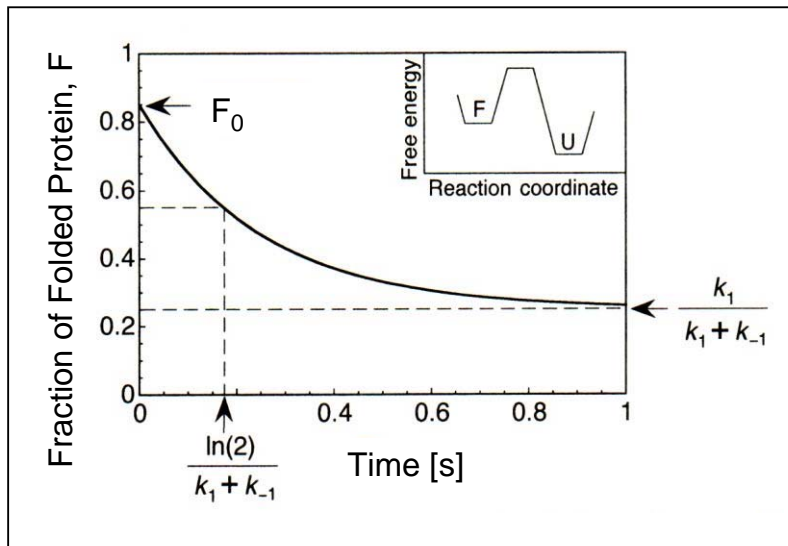


(1) Faltungskinetik (oder allgemeiner "Reaktionskinetik").

In der Graphik ist der experimentell bestimmte Zeitverlauf der Entfaltung eines Proteins dargestellt. (Das Experiment findet bei 20°C statt. Die Ratenkonstanten ("rate constant", auf Deutsch eigentlich Geschwindigkeitskonstante) der Faltung sollen mit k_1 und k_{-1} bezeichnet werden.)



(b) Bestimmen Sie die Ratenkonstanten der Hin- und Rückreaktion(en) und die Gibbs'sche Freie Energie der Faltung. Hierbei können die Einträge in der Graphik für Halbwertszeit oder Endwert (oder die Ergebnisse von 1c) nutzen!

Anmerkung: Nur Bestimmung der Zahlenwerte ist hier gefragt, die Herleitung ist Teil der Aufgabe 1c.

(c) Die Größe der Fraktion der gefalteten Proteine nähert sich dem Endwert gemäß einer Exponentialfunktion an, und zwar:

$$F(t) = (F_0 - F_{End})e^{-(k_1 + k_{-1})t} + F_{End}$$

Leiten Sie die obige Beziehung her und zeigen Sie, dass der Endwert und die Halbwertszeit wie in der Graphik angegeben von den Ratenkonstanten abhängen! Wovon hängt F_0 ab und was änderte sich zum Zeitpunkt $t=0$?

(2) Aktivierungsenergie; Transition-state theory

Für eine Elektronentransferreaktion (vom Tyrz zum Mangankomplex des PSII im $S_3 \rightarrow S_0$ Schritt - für die Rechnung nicht benötigte Zusatzinformation) wurden die Halbwertszeiten für verschiedene Temperaturen ermittelt. Die Ergebnisse sind in der folgenden Tabelle zusammengefasst.

T in °C	0	5	10	15	20	25	30
$t_{1/2}$ in ms	3,52	2,94	2,32	1,95	1,69	1,52	1,42

(a) Fertigen Sie einen Arrhenius-Plot an und bestimmen Sie die Aktivierungsenergie!

(Es handelt sich um 'echte' Daten, d. h. die Punkte werden nicht genau auf einer Geraden liegen. Ermitteln Sie die Regressionsgrade. Berechnen Sie auch die Standardabweichung zwischen den Werten der Regressionsgerade und den Messdaten.)

Geben Sie die Aktivierungsenergie in kJ/mol, kcal/mol und eV an (also drei Zahlenwerte)!

(b) Welche Information ist gemäß der klassischen *Transition-state theory* für chemische Reaktionen (diese gilt so nicht für Proteinfaltungsprozesse) in dem Pre-Exponentialfaktor enthalten?