

2. Übungsblatt

**(I) Benutzen sie das Programm „Jmol“ um einen Ramachandran Plot des Proteins „Katalase“ zu erzeugen.**

(download der Struktur **1JKU** aus der PDB Datenbank)

Erstellen sie den Ramach. Plot

**(\$ plot ramachandran)**

- a) Was ist ein Ramach. Plot, was bedeuten die farbig markierten Regionen im Plot? (1)
- b) Welche Aminosäuren treten gehäuft in den verschiedenen Regionen im Plot jeweils auf (nach Klicken auf die Symbole, siehe Kommando-Panel)? (1)
- c) welchen Sekundärstrukturmotiven könnten die im Ramach. Plot eingezeichneten Aminosäuren angehören? (1)
- d) Sind die aus dem Ramach. Plot zu vermutenden Struktur motive mit der wahren Struktur des Proteins in Übereinstimmung (Vergleichen sie mit Jmol Ansicht, untersuchen sie dies für 3 Aminosäuren)? (2)

**(II) Benutzen sie Jmol um den Metallkomplex der Katalase zu untersuchen.**

(Beispiele für entsprechende Kommandos siehe unten)

- a) Um was für einen Metall-Komplex handelt es sich, wie ist er ans Protein gebunden?  
(*machen sie eine Zeichnung der Metallatome und ihrer Aminosäure-Liganden*) (3)
- b) Welche Struktur- und Verbrückungs-Motive gibt es im Metallkomplex? (1)
- c) Enthält der Komplex Jahn-Teller verzerrte Metallatome ? (Metall-Ligand Distanzen ausmessen, JT-Achse?) (1)

**Jmol Kommandos (Beispiele, siehe auch Hilfe Dateien):**

**\$ select (manganese)**

**\$ select within (5, selected)**

**\$ cartoon off**

**\$ cpk 20%**

**\$ wireframe 20%**

**\$ color cpk**

**\$ center selected**

**\$ polyhedra 6 (manganese)**

**\$ color polyhedra translucent 0.5**

**(III) Übergangsmetalle**

**a)** Welche der folgenden Übergangsmetallionen sind im oktaedrischen Ligandenfeld „Jahn-Teller-aktiv“:  $\text{Cr}^{3+}$ ,  $\text{Cu}^{2+}$ ,  $\text{Ni}^{3+}$ ,  $\text{Mn}^{3+}$ ,  $\text{Fe}^{3+}$ ,  $\text{Cr}^{2+}$ ? (2)

**b)** Geben sie für die obigen Ionen die d-Elektronenkonfiguration an! Bei welchem der Ionen könnten High-spin Komplexe auftreten? (2)

**c)** Geben sie den Oxidationszustand des Metalls in den Komplexen  $[\text{Mn}(\text{H}_2\text{O})_5(\text{OH})]^{2+}$  und  $[\text{MnO}_4]^{1-}$  an! (1)