Abgabe am 10. April 2017 in der Vorlesung

Aufgabe 7.1. *Bindung von Enzym und Ligand* [†]

Im ersten Schritt der Glycolyse wird D-Glucose durch eine Hexokinase phosphoryliert. Die dabei auftretende Bindung von Glucose ($m_G = 180\,\mathrm{Da}$) an die wesentlich grössere Hexokinase ($m_H = 100\,\mathrm{kDa}$) kann als völlig unelastischer Stoss aufgefasst werden.

Ein Glucose-Molekül bewegt sich mit einer Geschwindigkeit $v_1 = 3.00\,\mathrm{m\,s^{-1}}$ und trifft auf eine Hexokinase, die sich vor dem Stoss in dem von uns gewählten Bezugssystem nicht bewegt. In dieser Aufgabe werden Sie die Geschwindigkeit und den Impuls des Komplexes nach der Bindung berechnen.

(a) Welche Grössenordnung erwarten sie für die Geschwindigkeit des Komplexes nach der Bindung?

(b) Benutzen Sie den Impulserhaltungssatz, um den Impuls und die Geschwindigkeit des Komplexes nach der Bindung zu berechnen.

Lösung.

(a) Wir vergleichen die Massen beider Körper (etwa 1 zu 1000) und erwarten eine Geschwindgkeit der Grössenordnung $10^{-3}\,\mathrm{m\,s^{-1}}$.

(b) Seien v und p die Geschwindigkeit bzw. der Impuls des Komplexes nach der Bindung. Der Gesamtimpuls ist erhalten. Vor dem Stoss bewegt sich die Hexokinase nicht, das Glucose-Molekül bewegt sich mit der Geschwindigkeit v_1. Wir haben also

$$\begin{aligned} p = m_G\, v_1 = 180\,\mathrm{Da} \times 3\,\mathrm{m\,s^{-1}} &= 540\,\mathrm{Da\,m\,s^{-1}} \\ &= 1.66 \times 10^{-27}\,\mathrm{kg\,Da^{-1}} \times 540\,\mathrm{Da\,m\,s^{-1}} \\ &= 8.96 \times 10^{-25}\,\mathrm{kg\,m\,s^{-1}}. \end{aligned} \tag{L.1}$$

Der Gesamtimpuls des Komplexes ist gleich dessen Gesamtmasse mal dessen Geschwindigkeit

$$p = (m_G + m_H)\, v \tag{L.2}$$

Wir lösen nach der Geschwindigkeit des Komplexes auf

$$\begin{aligned} v = \frac{p}{(m_G + m_H)} = \frac{m_G\, v_1}{m_G + m_H} &= v_1\, \frac{m_G}{m_G + m_H} \\ &= 3.00\,\mathrm{m\,s^{-1}}\, \frac{1.80 \times 10^2\,\mathrm{Da}}{1.80 \times 10^2\,\mathrm{Da} + 1.00 \times 10^5\,\mathrm{Da}} \\ &= 5.39 \times 10^{-3}\,\mathrm{m\,s^{-1}}. \end{aligned} \tag{L.3}$$

Aufgabe 7.2. *Stoss mit Wand* [††]

Am Beginn der Vorlesung haben wir diskutiert, wie wir ausgehend vom atomaren Aufbau der Materie Vorhersagen über makroskopisch messbare Grössen machen können. Wir haben dabei z. B. qualitativ untersucht, wie Druck, Temperatur und Dichte von Gasen zusammenhängen. Ein Resultat unserer Überlegungen war, dass wir die Temperatur durch eine *Kompression* des Gases erhöhen können.

In dieser Aufgabe möchten wir diesen Prozess auf der Ebene von einzelnen Molekülen verstehen und nachvollziehen. Wir betrachten dafür ein einzelnes Wassermolekül ($m_{H_2O} = 18\,\mathrm{Da}$), das sich entlang der x-Achse bewegt. Es hat anfangs eine Energie $E_1 = 2.1 \times 10^{-21}\,\mathrm{J} \simeq 13\,\mathrm{meV}$ und fliegt auf eine Wand zu, die sich mit der Geschwindigkeit $v_W = -1\,\mathrm{m\,s^{-1}}$ nach links bewegt, siehe Abbildung 7.1.

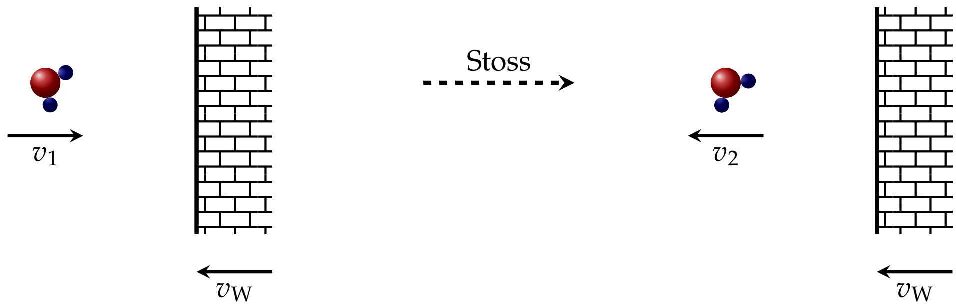

Abbildung 7.1: Ein Wassermolekül stösst mit einer bewegten Wand.

Wir möchten nun herausfinden, wie viel Energie bei dem Stoss mit der beweglichen Wand auf das Wassermolekül übertragen wird.

Hinweis. Wir nehmen zur Vereinfachung an, dass die Wand 'unendlich schwer' ist, also '$m_W = \infty$'.

(a) Berechnen Sie die Geschwindigkeit v_1 des Wassermoleküls vor dem Stoss.

(b) Unter der Annahme eines elastischen Stosses mit der Wand, berechnen Sie die Geschwindigkeit v_2 nach dem Stoss.

Hinweis. Sie können dazu die Resultate aus dem Skript mit $m_1 \equiv m_W \gg m_2 \equiv m_{H_2O}$ benutzen.

(c) Welcher Impuls wurde übertragen? Wie lange hat der Stoss gedauert, wenn eine durchschnittliche Kraft von $F = 1 \times 10^{-8}\,\mathrm{N}$ wirkt?

(d) Wie gross ist der Energieunterschied des Wassermoleküls?

(e) Ist das Wassermolekül nun schneller oder langsamer? Erklären Sie qualitativ, wie dieser Prozess mit einer Temperaturänderung zusammenhängen könnte.

Lösung.

(a) Wir kennen die kinetische Energie des Wassermoleküls:

$$E_1 = \tfrac{1}{2} m_{H_2O}\, v_1^2 \tag{L.4}$$

Durch Umformen erhalten wir

$$v_1 = \sqrt{\frac{2E_1}{m_{H_2O}}} = \sqrt{\frac{2 \times 2.1 \times 10^{-21}\,\mathrm{J}}{18\,\mathrm{Da}}} = \sqrt{\frac{2 \times 2.1 \times 10^{-21}\,\mathrm{kg\,m^2\,s^{-2}}}{18 \times 1.66 \times 10^{-27}\,\mathrm{kg}}} = 375\,\mathrm{m\,s^{-1}} \tag{L.5}$$

(b) Es gilt der Impulserhaltungssatz und da es sich um einen elastischen Stoss handelt ist auch die kinetische Energie erhalten. Im Skript (Seite 128) wurde der Fall

$m_1 \gg m_2$ diskutiert. Die Endgeschiwindigkeit $v_{2,\mathrm{E}}$ ist in dieser Situation gegeben durch:

$$v_{2,\mathrm{E}} = (2 - \frac{2m_2}{m_1})v_{1,\mathrm{A}} - (1 - \frac{2m_2}{m_1})v_{2,\mathrm{A}} \tag{L.6}$$

wobei $m_1 \equiv m_\mathrm{W}$ und $m_2 \equiv m_{\mathrm{H_2O}}$. Zu breachten gilt, dass die Geschwindigkeiten im Skript anders als in der Aufgabe bennant sind. Wir identifizieren die Geschwindigkeit der grossen Masse mit $v_{1,\mathrm{A}} \equiv v_\mathrm{w}$, und somit $v_{2,\mathrm{A}} = v_1$ und $v_{2,\mathrm{E}} = v_2$, also:

$$v_2 = (2 - \frac{2m_{\mathrm{H_2O}}}{m_\mathrm{W}})v_\mathrm{W} - (1 - \frac{2m_{\mathrm{H_2O}}}{m_\mathrm{W}})v_1 \tag{L.7}$$

Da $m_\mathrm{W} \to \infty$ wird der Bruch $\frac{m_{\mathrm{H_2O}}}{m_\mathrm{W}} \to 0$ und es bleibt

$$v_2 = 2v_\mathrm{W} - v_1 = -2 \times 1\,\mathrm{m\,s^{-1}} - 375\,\mathrm{m\,s^{-1}} = -377\,\mathrm{m\,s^{-1}} \tag{L.8}$$

(c) Der von der Wand auf das Molekül übertragene Impuls beträgt

$$\Delta p = m_{\mathrm{H_2O}} \cdot \Delta v \tag{L.9}$$

mit

$$\Delta v = v_2 - v_1 = 2v_\mathrm{W} - 2v_1 = -2 \times 1\,\mathrm{m\,s^{-1}} - 2 \times 375\,\mathrm{m\,s^{-1}} = -752\,\mathrm{m\,s^{-1}} \tag{L.10}$$

ergibt sich

$$\Delta p = 18 \times 1.66 \times 10^{-27}\,\mathrm{kg} \times (-752\,\mathrm{m\,s^{-1}}) = 2.25 \times 10^{-23}\,\mathrm{N\,s} \tag{L.11}$$

Die Impulsänderung $\Delta\vec{p} = \int \vec{F}(t)dt$ vereinfacht sich für eine zeitlich konstante Kraft in x-Richtung zu $\Delta p = F \cdot \Delta t$. Für eine Kraft von $F = 1 \times 10^{-8}\,\mathrm{N}$ ergibt sich eine Kollisionszeit von $\Delta t = 2 \times 10^{-15}\,\mathrm{s}$.

(d) Die Energie des Wassermoleküls nach dem Stoss beträgt

$$E_2 = \tfrac{1}{2} m_{\mathrm{H_2O}} \cdot v_2^2 = \tfrac{1}{2} \times 18 \times 1.66 \times 10^{-27}\,\mathrm{kg} \times \left(377\,\mathrm{m\,s^{-1}}\right)^2 = 2.12 \times 10^{-21}\,\mathrm{J} \tag{L.12}$$

also ist der Energieunterschied:

$$\Delta E = E_2 - E_1 = 2.12 \times 10^{-21}\,\mathrm{J} - 2.1 \times 10^{-21}\,\mathrm{J} = 2 \times 10^{-23}\,\mathrm{J} = 0.1\,\mathrm{meV} \tag{L.13}$$

(e) Das Wassermolekül ist nach dem Stoss schneller. Habe ich viele Wassermoleküle und bewege eine Wand auf sie zu werden die Moleküle schneller. Eine solche Situation ist etwa gegeben, wenn ich Wasser in einem Behälter mit einem Kolben komprimiere. Die Wassermoleküle werden schneller und daher erhöht sich die Temperatur der Flüssigkeit.

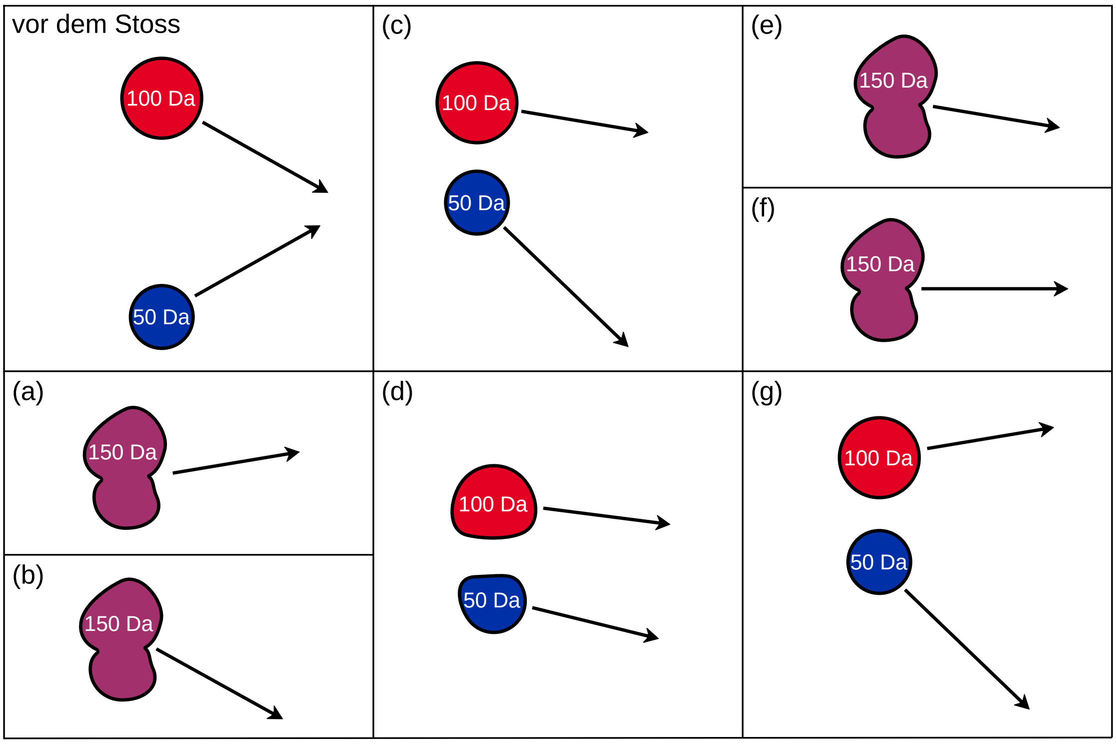

Abbildung 7.2: Zwei Körper vor einem Stoss, und hypothetische konfigurationen der Geschwindigkeiten (a) bis (g) nach dem Stoss, wovon nur einige physikalisch möglich sind. Die Pfeile stellen die Geschwindigkeiten der Körper dar.

Aufgabe 7.3. *Konzeptaufgabe Impulserhaltung* *[††]*

In Abbildung 7.2 sind zwei Moleküle der Massen 100 Da und 50 Da unmittelbar vor einem Stoss dargestellt. Die Teile (a) bis (g) des Bilds zeigen hypothetische Situationen nach dem Stoss. Die Pfeile stellen Geschwindigkeiten dar.

(a) Welche der Situationen (a) bis (g) sind möglich?

(b) Welche davon entsprechen elastischen, inelastischen, maximal inelastischen Stössen?

Lösung.

(a) Um zu entscheiden, ob eine der hypothetische Lagen nach dem Stoss physikalisch möglich ist, müssen wir verifizieren, ob der Gesamtimpuls erhalten ist. Die Bewegungsenergie muss nicht erhalten sein, ein Teil davon wird im Fall eines inelastischen Stosses in Verformungsarbeit umgewandelt. Zuerst bestimmen wir den Gesamtimpuls durch graphische addition der Vektorenpfeile, wie in Abbildung 7.3 dargestellt. Wir zeichnen den Gesamtimpuls für jede Situation (a) bis (g) in Abbildung 7.4 und vergleichen die Länge der Pfeile. Alle Komponenten des Impulsvektors müssen erhalten sein. Dies gilt für die Geschwindigkeitskonfigurationen (d), (e) und (g). Alle anderen sind nicht möglich.

(b)
- In (d) ist ein inelastischer Stoss dargestellt: beide Geschwindigkeitspfeile sind deutlich kürzer als vor dem Stoss, die kinetische Energie ist also nicht erhalten.

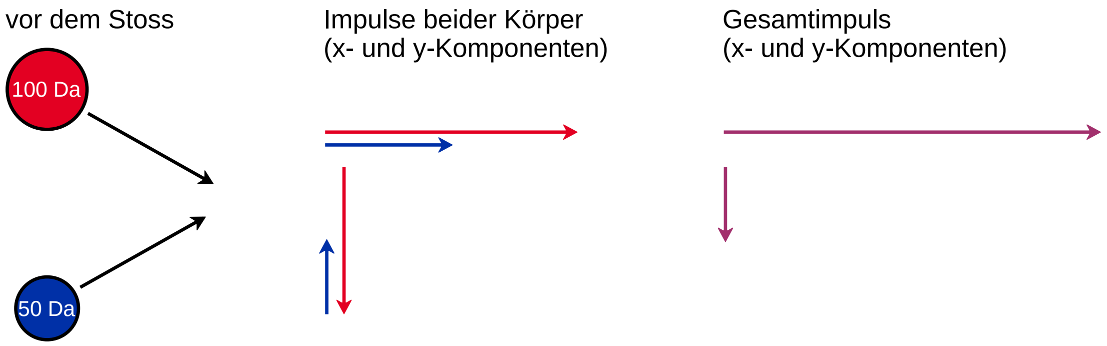

Abbildung 7.3: Impulse der beiden Molekülen in x- und y-Komponenten zerlegt (rote und blaue Pfeile) und Gesamtimpuls (violette Pfeile). Der Massstab für die Länge der Impulspfeile wurde wie folgt gewählt: [Geschwindigkeitspfeil der Länge L] × 50 Da = [Impulspfeil der Länge L].

- In Bild (e) sind beide Moleküle sind gebunden und der Geschwindigkeitsvektor ist ebenfalls kürzer als beide Geschwindigkeitsvektoren in der Endlage. Wir sehen einen völlig inelastischen Stoss, in diesem Fall wird die Bewegungsenergie maximal reduziert.
- Im Fall (g) ist es auf den ersten Blick nicht klar, wir müssen die Geschwindikeiten messen. Unsere Aussage ist unabhängig von dem Masstab der Geschwindigkeitspfeilen, wir wählen willkürlich $1\,\mathrm{mm} \equiv 1\,\mathrm{m\,s^{-1}}$ und messen auf 1 mm genau mit Hilfe eines Lineals (tatsächlich wurde hier Inkscape verwendet):
  Geschwindigkeit des roten (100 Da) Moleküls vor dem Stoss (i für initial) :
  $$v_{100}^{i} = 19\,\mathrm{m\,s^{-1}} \tag{L.14}$$
  Geschwindigkeit des blauen (50 Da) Moleküls vor dem Stoss:
  $$v_{50}^{i} = 19\,\mathrm{m\,s^{-1}} \tag{L.15}$$
  Geschwindigkeit des roten Moleküls nach dem Stoss (f für final):
  $$v_{100}^{f} = 17\,\mathrm{m\,s^{-1}} \tag{L.16}$$
  Geschwindigkeit des blauen Moleküls nach dem Stoss:
  $$v_{50}^{f} = 23\,\mathrm{m\,s^{-1}} \tag{L.17}$$

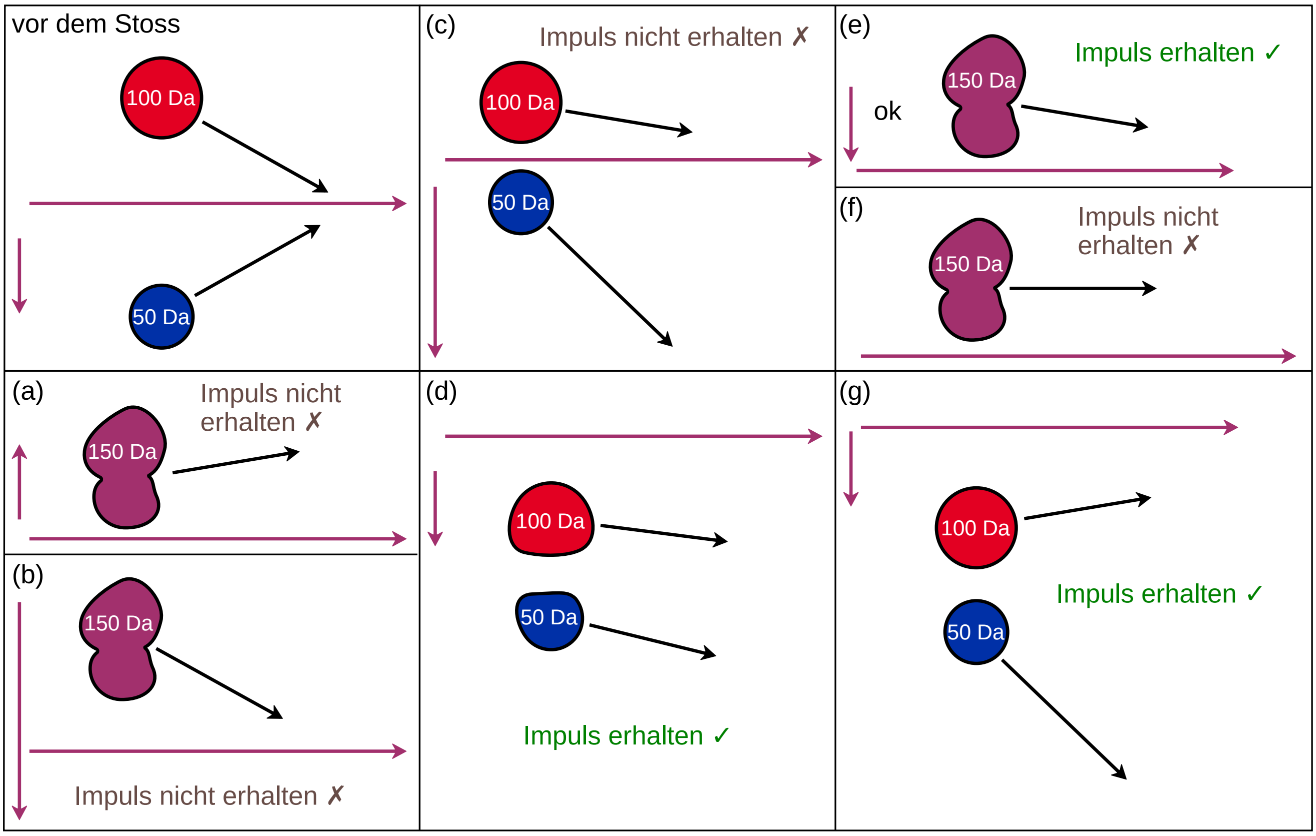

Abbildung 7.4: Komponenten des Gesamtimpules in allen hypothetischen Lagen nach dem Stoss (violette Pfeile)

Wir vergleichen die Gesamtbewegungsenergien vor und nach dem Stoss:

$$\begin{aligned} E^i_{\text{kin}} &= \frac{1}{2} \times 100\,\text{Da} \times \left(v^i_{100}\right)^2 + \frac{1}{2} \times 50\,\text{Da} \times \left(v^i_{50}\right)^2 \\ &= \frac{1}{2} \times 100\,\text{Da} \times (19\,\text{m}\,\text{s}^{-1})^2 + \frac{1}{2} \times 50\,\text{Da} \times (19\,\text{m}\,\text{s}^{-1})^2 \\ &= 2.7 \times 10^4\,\text{Da}\,\text{m}^2\,\text{s}^{-2} \\ E^f_{\text{kin}} &= \frac{1}{2} \times 100\,\text{Da} \times \left(v^f_{100}\right)^2 + \frac{1}{2} \times 50\,\text{Da} \times \left(v^f_{50}\right)^2 \\ &= \frac{1}{2} \times 100\,\text{Da} \times (17\,\text{m}\,\text{s}^{-1})^2 + \frac{1}{2} \times 50\,\text{Da} \times (23\,\text{m}\,\text{s}^{-1})^2 \\ &= 2.8 \times 10^4\,\text{Da}\,\text{m}^2\,\text{s}^{-2} \end{aligned} \tag{L.18}$$

Wir finden die gleiche Bewegungsenergie bis auf einen kleinen Messfehler. Der Stoss ist also elastisch.