

CIW Blatt 01, Aufgabe 2

Alexander Rahlf, Inken Fender, Jan Fröchtling

Abgabe: 04.05.2020

a)

Es handelt sich um die Wirkstoffe Oseltamivir (a) und Zanamivir (b). Diese Wirkstoffe blockieren die N1 Neuraminidase H274Y des Influenza A Virus und werden somit bei Influenza Erkrankungen eingesetzt.

b)

Das Biologisch aktive Protein ist aus vier Einheiten aufgebaut. Das Protein interagiert mit Ca^{2+} -Ionen. Die Beta-Faltblatt-Struktur überwiegt stark.

c)

Es sind viele Wasserstoffbrückenbindungen zwischen den Liganden und der Neuraminidase vorhanden. Diese Wasserstoffbrückenbindungen werden mit Tyrosin, Arginin und Asparaginsäure ausgebildet. Oseltamivir bildet außerdem eine Brücke zum Rückgrat eines Tryptophans aus.

d)

Die Lipinski Rule of Five besagt unter anderem, dass ein Wirkstoff gut oral eingenommen werden kann, wenn er maximal 5 Wasserstoffbrückenbindungsdonatoren aufweist [1] (Kapitel 19). Wirkstoff b hat allerdings 9 H-Atome, zu denen potentiell eine Wasserstoffbrückenbindung aufgebaut werden könnte. Wirkstoff a hingegen, hat nur 4.

References

- [1] *Protein-Ligand-Wechselwirkungen als Grundlage der Arzneistoffwirkung*, pages 49–67. Spektrum Akademischer Verlag, Heidelberg, 2009. ISBN 978-3-8274-2213-2. doi: 10.1007/978-3-8274-2213-2_5. URL https://doi.org/10.1007/978-3-8274-2213-2_5.