



Freiwilliges Übungsblatt
für die Vorlesung
Einführung in die Bioinformatik
3. Designerdrogen — Wirkstoffe aus dem Rechner

elektronische Abgabe an: schubert@informatik.uni-tuebingen.de

Aufgabe 1 Recherche beim BfArM, bei der FDA und in DrugBank

- (a) Finden Sie zunächst heraus, wofür die Abkürzung **BfArM** steht. Gehen Sie dann auf die Internet-Präsenz dieser Organisation und finden Sie heraus, wieviele Arzneimittel derzeit in Deutschland zugelassen sind.
- (b) Was bedeuten die Bezeichnungen „verschreibungspflichtig“ und „apothekenpflichtig“? Wieviele der zugelassenen Arzneimittel sind verschreibungspflichtig, wieviele sind apothekenpflichtig?
- (c) Die entsprechende Organisation in den USA heißt **FDA**. Finden Sie auf der Webseite der FDA heraus, welcher Wirkstoff im Präparat „Relenza“ enthalten ist und wogegen dieser Wirkstoff verschrieben wird.
- (d) Finden Sie mit Hilfe der Datenbank **DrugBank** folgende Dinge heraus:
- Die Strukturformel von Zanamivir.
 - Welche Pharmafirma Zanamivir vermarktet.
 - Wieviel mg Zanamivir sich pro ml Wasser lösen.
 - Wie Zanamivir aus dem Körper wieder ausgeschieden wird.

Aufgabe 2 Schlüssel-Schloss-Prinzip

- (a) Erklären Sie mit eigenen Worten das Schlüssel-Schloss-Prinzip von Emil Fischer. Fertigen Sie zudem je eine Skizze eines an ein Protein gut und nicht gut gebundenen Wirkstoffes an.
- (b) Finden Sie heraus, was es mit dem Begriff „Allosterie“ auf sich hat. Erläutern Sie, wie Allosterie mit dem Schlüssel-Schloss-Prinzip zusammenhängt.

Aufgabe 3 Auswahl von geeigneten Targets

Bei der Entwicklung eines Wirkstoffes gegen Infektionen mit *Helicobacter pylori* ist das Enzym mit der EC-Nummer 3.5.1.5 als Target besonders geeignet. Wie ist der Name dieses Enzyms? Erklären Sie, warum es in diesem Fall als Target besonders geeignet ist.