



Übungsblatt 8 Abgabe bis 27.06.2022 vor der Übung

Vorname, Name:

1. Vergleichen Sie die H-Brückennetzwerke die die Webserver ProToos und pdb2pqr für die pdb Datei 6H5W (Angiotensin converting enzyme mit gebundenem Inhibitor omapatrilat) erzeugen. Benutzen Sie dazu die vorhandenen default Einstellungen.

ProToss: <https://proteins.plus>

pdb2pqr: <https://server.poissonboltzmann.org/pdb2pqr>

Hier das pqr File herunterladen. Dieses hat bis auf die letzten beiden Spalten dieselbe Formatierung wie eine pdb Datei.

Vorgehensweise:

Erstellen Sie eine Interaktionsmatrix (residue/residue) der H-Brücken im Protein (nur zwischen den Aminosäuren). Eine H-Brücke besteht dann, wenn der Abstand zwischen dem entsprechenden H-Atom und dem Akzeptoratom kleiner als 2.5 Ångström ist. In Frage kommende H-Atome (3. Spalte) sind H, HD1, HD2, HD21, HD22, HE, HE1, HE2, HE21, HE22, HG, HG1, HH, HH2, HH11, HH12, HH21, HH22, HOD2, HOE2, HZ1, HZ2, HZ3. Als Akzeptoren der H-Brücken sind O, OD1, OD2, OE1, OE2, OG, OG1, ND1, NE2 möglich. (Ist der Abstand kleiner als 1.1 Ångström liegt eine kovalente Bindung vor). Stellen Sie die Anzahl der H-Brücken als Venn-Diagramm dar.

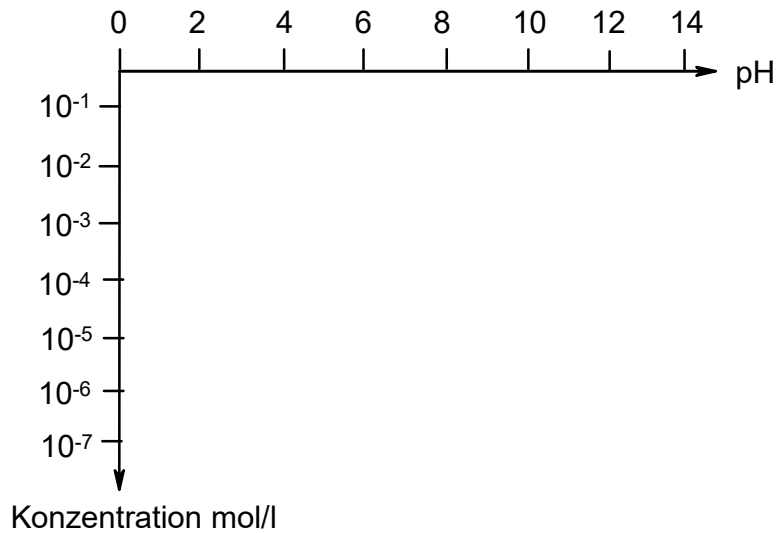
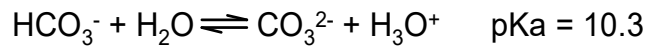
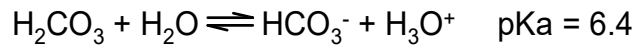
(50 Punkte)

2. Rechnen Sie die experimentell ermittelten Bindungskonstanten K_i von enalaprilat (0.3nM) und omapatrilat (6.0 nM) in ΔG Werte bei 298K um. $R = 8.314 \text{ J K}^{-1} \text{ mol}^{-1}$

Welcher der beiden Inhibitoren bindet stärker?

(10 Punkte)

3. Es liegt eine 0.1 molare Lösung von H_2CO_3 vor. Zeichnen Sie in die untere Grafik den Konzentrationsverlauf der auftretenden Ionen und anderer Komponenten (H_3O^+ , OH^- , neutrale Verbindungen) zwischen $\text{pH}=0$ und $\text{pH}=14$ ein. (20 Punkte)



4. Erläutern Sie warum a) Ionen in wässriger Lösung energetisch sehr viel günstiger sind als in der Gasphase, und b) wieso es dann schwerlösliche Salze gibt. (20 Punkte)