



**Übungsblatt 8** Abgabe bis 26.06.2023 vor der Übung

**Vorname, Name:**

1. Vergleichen Sie die H-Brückennetzwerke die die Webserver ProToos und pdb2pqr für die pdb Datei 1TBF (Phosphodiesterase 5A mit gebundenem Inhibitor sildenafil) 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.

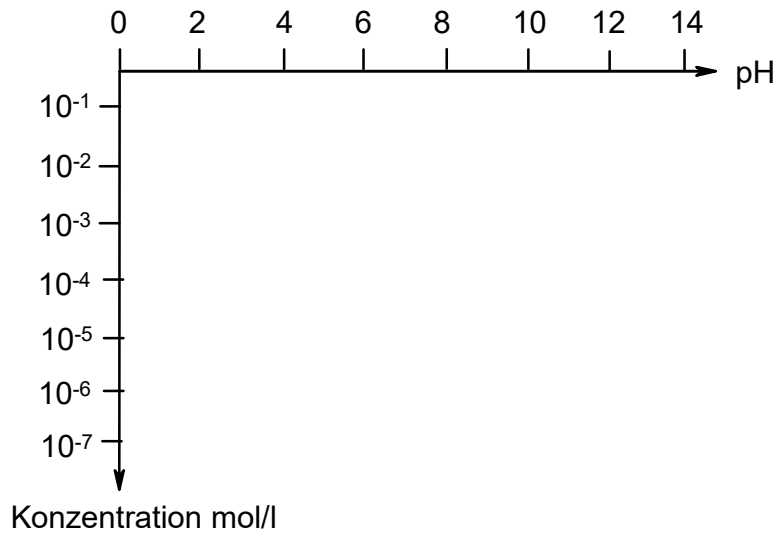
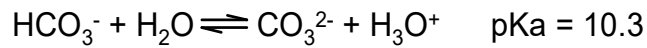
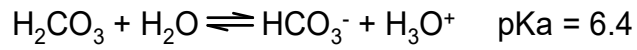
(50 Punkte)

2. Rechnen Sie die experimentell ermittelten Bindungskonstanten  $K_i$  von sildenafil (1.9 nM) und avanafil (5 nM) in  $\Delta G$  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  $\text{H}_2\text{CO}_3$  vor. Zeichnen Sie in die untere Grafik den Konzentrationsverlauf der auftretenden Ionen und anderer Komponenten ( $\text{H}_3\text{O}^+$ ,  $\text{OH}^-$ , 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)