

Welcher Wirkstoff ist der beste?-Teil I

Aufgabe der medizinischen Chemie ist es, geeignete Wirkstoffe für ein bestimmtes Target zu entwickeln. Ein Wirkstoff ist dann geeignet, wenn er das Target mit sehr hoher Wahrscheinlichkeit erreicht. Hierfür können gewisse Eigenschaften des Wirkstoffs wie zum Beispiel Größe, Flexibilität, Wasserlöslichkeit, elektrische Ladungsverteilung, Langlebigkeit oder aber auch Abbaubarkeit von Vorteil sein. Konkret besteht die Aufgabe der Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftler darin, unter verschiedenen synthetisierbaren, d.h. im Labor herstellbaren, Wirkstoffkandidaten den besten auszuwählen.

Stell dir vor, es stehen drei Wirkstoffkandidaten zur Auswahl. In Abbildung 13 sind diese als schwarzer, weißer und roter Kreis dargestellt. Jeder der drei Wirkstoffe hat besondere Eigenschaft. Der schwarze Wirkstoff kann weiße und rote Barrieren nicht überwinden. Dafür kann er schwarze Barrieren ungehindert durchqueren. Analog kann der weiße Wirkstoff nur weiße Barrieren und der rote Wirkstoff nur rote Barrieren ungehindert durchqueren. Starten sollen die Wirkstoffe jeweils im Startfeld.

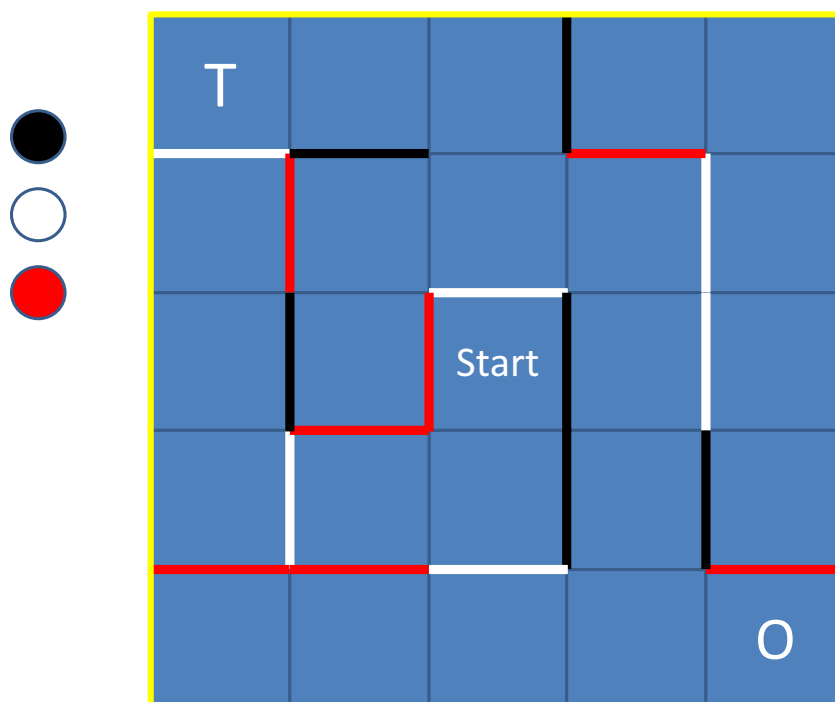


Abbildung 13: Für dieses Labyrinth stehen drei Wirkstoffe (schwarz, weiß, rot) zur Auswahl.

Aufgabe:

Finde für jeden Wirkstoff den kürzesten Weg i) vom Startfeld zum Target ii) vom Startfeld zum Off-Target. Zeichne die Wege im Labyrinth ein. Welchen Wirkstoff würdest du empfehlen?