



Aufgabenstellungen für das Ferienpraktikum **Chemie für Schülerinnen und Schüler** **vom 16. bis 19. Oktober 2006 (3. und 4. Tag)**

Wählen Sie bitte sechs für Sie interessante Versuche aus. Wir bemühen uns, bei der Einteilung auf die vier Arbeitsgruppen die persönlichen Interessen weitgehend zu berücksichtigen.

Die Abkürzungen der Versuche beziehen sich auf die anbietenden Einheiten.

Es bedeuten:	TMC	Technische und Makromolekulare Chemie
	PHA	Pharmazie
	GTW	Gewerblich-Technische Wissenschaften
	LC	Lebensmittelchemie
	OC	Organische Chemie
	AC	Anorganische und Angewandte Chemie
	BC	Biochemie
	PC	Physikalische Chemie

Aufgabenstellung TMC 1: Strömungsvisualisierung in Chemiereaktoren -Taylorreaktor

(für 4 TeilnehmerInnen, Arbeitskreis Prof. H.-U. Moritz)

Wohl jeder kennt den ältesten chemischen Reaktor der Menschheit – „Den Kochtopf“. Der Chemiker spricht auch Heute noch vom Kochen. So kommt man in der Schule und im Studium viel mit Reagenzgläsern und Glaskolben in Kontakt, die eigentlich nichts anders als Kochtöpfe sind.

In dem angebotenen Versuch besteht dagegen die Möglichkeit, einen modernen Reaktortyp, den Taylorreaktor, kennenzulernen. Der Taylor-Reaktor ist ein spezieller chemischer Reaktortyp, der zur Produktion im großindustriellen Maßstab, beispielsweise von Lackrohstoffen, eingesetzt werden kann. In unserem Technikum sollen die Flüssigkeitsströmungen sowie die Stoffvermischung in verschiedenen durchsichtigen Taylor-Reaktoren sichtbar gemacht werden. Die Informationen über das Strömungsverhalten eines Reaktors ermöglicht es, geeignete Verfahren zur Synthese chemischer Substanz zu entwickeln.

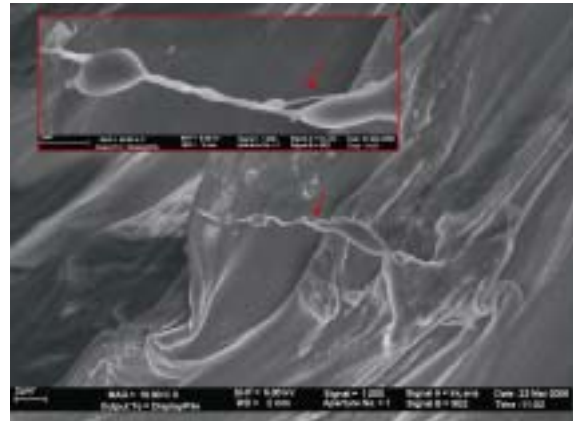
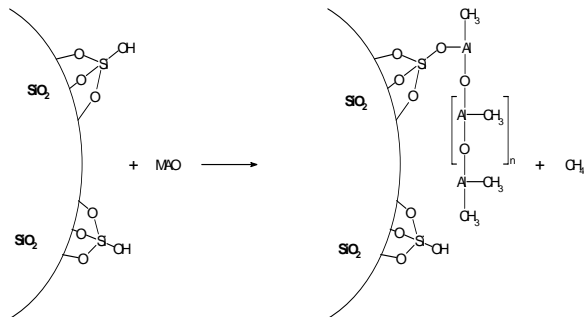
Es ist jedes Mal aufs Neue faszinierend die unterschiedlichen Strömungsformen zu beobachten.



Aufgabenstellung TMC 2: Herstellung von Kunststoffnanocomposites

(für 4 TeilnehmerInnen, Arbeitskreis Prof. W. Kaminsky)

Polyolefine wie Polyethylen, Polypropylen stellen die größte Gruppe aller Kunststoffe dar. Diese werden meist mit Übergangsmetallkomplexen hergestellt. Neue Metallocen-Katalysatoren sind in Kohlenwasserstoffen löslich und können auf Nanopartikel oder Nanofasern aufgezogen werden. Durch Zufuhr von Ethen- oder Propen-Gasen lassen sich Nanocomposites (mit Kunststoff überzogene Nanoteilchen) herstellen mit ganz neuen, herausragenden Eigenschaften. Anwendungen ergeben sich z.B. für die Automobil- und Flugzeugtechnik.



Reaktion von MAO mit der Oberfläche eines Silikat-Nanopartikels

Bruchkante eines iPP/MWCNT Nanocomposites. Abbildung zeigt ein separiertes Nanotube bzw. Nanotube-Bündel, das aus der Bruchkante herausragt. An der markierten Position ist das Nanotube ohne den Polymerfilm zu sehen.

Aufgabenstellung PHA 1: Vom Naturstoff zum Arzneimittel - Über 100 Jahre Aspirin®

(für 4 TeilnehmerInnen, Arbeitskreise Prof. H. –J. Duchstein, Prof. C.S. Leopold)

Die Weidenrinde wird als Naturstoff und Arzneidroge vorgestellt, aus der in einem 1. Teil der Inhaltsstoff Salicin isoliert wird. Es folgen Nachweis und Verarbeitung zu Salicylsäure (Zwischenprodukt), die als Ausgangsstoff für die Synthese der Acetylsalicylsäure dient. Die Patentanmeldung der Fa. Bayer für diesen Arzneistoff erfolgte im Jahr 1899. Die Synthese und der Nachweis des Produktes (Arzneistoff) wird in einem 2. Teil gezeigt. Der 3. Teil beinhaltet die Herstellung des Arzneimittels aus dem Arzneistoff, d.h. es wird Acetylsalicylsäure granuliert und zu Tabletten (Darreichungsform) verpresst. Im 4. Teil wird der Weg des Arzneistoffes durch den Organismus beschrieben (Resorption, Metabolisierung, Verteilung, Elimination) und die Konzentrationsverläufe in den Körperflüssigkeiten spektroskopisch gemessen.

Aufgabenstellung PHA 2: Die Chemie der Kamillenblüten

(für je 4 TeilnehmerInnen, Arbeitskreis Prof. E. Stahl-Biskup)

Kamillenblüten werden als Tee zur Behandlung von Magen-Darm-Beschwerden getrunken oder in anderen Zubereitungen (Salben, Lotion) äußerlich zur Behandlung von Hautkrankheiten eingesetzt. Erkältungen kann man günstig durch Inhalieren mit Kamille beeinflussen. Diese Wirkungen sind auf verschiedene Inhaltsstoffe zurückzuführen. Als solche sind sowohl fettlösliche (lipophile) Inhaltsstoffe zu nennen, zu denen die flüchtigen Bestandteile des ätherischen Öls, wie Bisabolol, Bisabololoxide, Bisabolonoxide, die En-In-Dicycloether, das Chamazulen und weitere Mono- und Sesquiterpene zählen. Ebenfalls lipophil, aber nicht flüchtig und deshalb im ätherischen Öl nicht nachweisbar, sind Herniarin und Umbelliferon (Cumarine) und Matricin (Sesquiterpenlacton). An wasserlöslichen (hydrophilen) Inhaltsstoffen sind vor allem die Flavonglykoside (Luteolin- und Apigeninglucosid) von Bedeutung. Außerdem sind Schleimstoffe enthalten.

Im Praktikum werden diese Inhaltsstoffe sowohl durch Wasserdampfdestillation (flüchtige Inhaltsstoffe) als auch durch Extraktion mit Lösungsmitteln (Flavonoide, Cumarine) aus den Kamillenblüten gewonnen. Die Analyse der Inhaltsstoffe erfolgt mittels Dünnschichtchromatographie und Gaschromatographie. Mit diesen Methoden lassen sich die verschiedenen Zubereitungsformen der Droge (Tee, Lösungsmittel-extrakt und ätherisches Öl) anhand ihrer Inhaltsstoffspektren eindrucksvoll unterscheiden. Die chemische Struktur der Wirkstoffe wird

vorgestellt und diskutiert. Die Qualität eines Kamillen-Musters aus der Apotheke wird nach dem Europäischen Arzneibuch geprüft (Gehalt an ätherischem Öl). Wenn gewünscht, kann die Kamille auch unter dem Mikroskop betrachtet werden.

Aufgabenstellung GTW: Photometrische Messungen zur Untersuchung der Haut

(für 4 TeilnehmerInnen, Arbeitskreis Prof. M. Kerscher)

Verschiedenste chemische und physikalisch-chemische Messprinzipien haben in Naturwissenschaft sowie Medizin eine große Bedeutung. Eines der wohl am weitesten verbreiteten Messprinzipien sind photometrische Messungen, die sich gemäß dem Lambert-Beer'schen Gesetz spezifische Wechselwirkungen von Molekülen und Licht zu Nutze machen, um Stoffkonzentrationen und Stoffmengen zu bestimmen.

Gegenstand des Kurses sollen mit der Bestimmung der Ammonium- und Talgmengen auf der Hautoberfläche mittels photometrischer Messung zwei Untersuchungsansätze sein, die zum Beispiel zur Untersuchung der Hautbarrierefunktion und des Talgdrüsensekretionszustandes sowie zur Evaluation von Hautreinigungsprodukten dienen können.

Hierbei soll zur Bestimmung der Ammonium-Menge, zunächst eine Probe, die durch Spülen ein kleines Hautareals am Unterarm mit einer geringen Menge Ammonium-freien Reinstwassers gewonnen wird, zunächst alkalisiert werden, um Ammonium in Ammoniak zu überführen. Anschließend wird das Ammoniak unter Einfluss von Hypochlorit in Chloramin umgewandelt, das dann in einem weiteren Schritt sukzessive mit Hilfe zweier Moleküle Thymol in den Farbstoff Indophenol umgesetzt wird (Abb.1). Die photometrisch bestimmbare Konzentration des Farbstoffes kann dann zur Bestimmung der Ammonium-Menge dienen. Die Bestimmung der Talgmenge erfolgt mittels eines löschpapierartigen Kunststoffbandes, von dem Talgfette an der Hautoberfläche aufgenommen werden (Abb.2) und deren Menge dann durch Veränderung der Transparenz des Kunststoffbandes ohne weitere Aufarbeitung photometrisch gemessen werden kann.

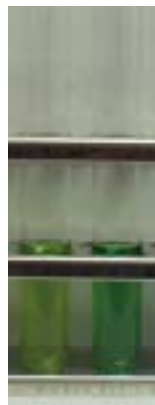


Abb.1



Abb. 2

Aufgabenstellung LC 1: Lebensmittelsensorik

(für je 6 TeilnehmerInnen, Arbeitskreis Prof. H. Steinhart)

Die Lebensmittelsensorik spielt eine wichtige Rolle im Bereich der Aromastoffforschung, der Produktentwicklung und der Produktionskontrolle im Unternehmen. Um eine gleich bleibende Qualität im Herstellungsprozess zu gewährleisten, werden die produzierten Waren regelmäßig (zumeist täglich) nach Geruch, Geschmack und Textur (z.B. Bissfestigkeit) beurteilt. Im Rahmen einer kleinen Gruppe von 6 Personen sollen einige Einblicke in die Grundlagen der Lebensmittelsensorik gegeben werden. Hierzu werden verschiedene Lebensmittel verkostet, um den Geschmack und den Geruch in der Gruppe wissenschaftlich zu beschreiben. Abweichungen von einer festgelegten Qualitätsnorm werden am besten mit einem Triangeltest erfasst.



Hierbei erhalten die Teilnehmer drei Proben, von denen 2 identisch sind und eine abweicht. Durch Riechen und Schmecken muss die abweichende Probe von der Gruppe identifiziert werden und die Art der Abweichung beschrieben werden. Mit Hilfe der Lebensmittelsensorik lassen sich viele Qualitätsparameter einfacher beschreiben als es mit instrumentell-analytischen Methoden möglich wäre. Zur Veranschaulichung wird in einem dritten Teil ein Aromastoffgemisch mit Hilfe der Gaschromatographie analysiert. Hierbei sollen die Teilnehmer im Rahmen einer so genannten olfaktometrischen Analyse, die Aromakomponenten selber durch Riechen identifizieren. Zusätzlich erfolgt eine massenspektrometrische Analyse der Aromastoffe.

Aufgabenstellung LC 2: Analytik von Kohlenhydraten

(für je 3 TeilnehmerInnen, Arbeitskreis Prof. H. Steinhart)

Zucker und Kohlenhydrate stellen wichtige Lebensmittelbestandteile dar. Allerdings ist der Anteil an Zucker in der heutigen Ernährung viel zu hoch und verursacht im Übermaß gesundheitliche Probleme. Für die Beurteilung der ernährungsphysiologischen Qualität von Lebensmitteln ist es daher wichtig, die genaue Zusammensetzung der verschiedenen Zucker in Lebensmitteln sowie ihren genauen Gehalt zu ermitteln. Für die Identifizierung von Zuckern in Erfrischungsgetränken (z.B. Cola), Fruchtsäften, Fruchtsaftgetränken und alkoholischen Getränken (sogenannte „Alcopops“) werden die Zucker mittels einer dünnenschichtchromatographischen Analyse identifiziert. Für die quantitative Analyse von Kohlenhydraten wird das Analysenverfahren nach Luff-Schoorl verwendet. Die Zucker reagieren mit einer Kupfersulfat-Lösung in der Siedehitze, wobei die Kupferionen durch Zucker reduziert werden.

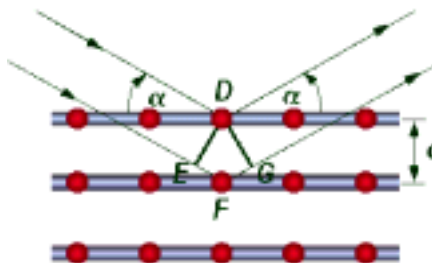


Der Überschuss an Kupferionen wird dann iodometrisch titriert. Die Gehaltsbestimmung von reduzierenden Zuckern (z.B. Glucose und Fruktose) wird ohne vorherige Hydrolyse durchgeführt. Der so nicht erfasste Haushaltszucker (Saccharose) muss zunächst hydrolytisch durch Säuren gespalten werden. Da bei diesem Versuch mit Bunsenbrenner und Rückflusskühler gearbeitet werden muss, können an diesem Versuch maximal 3 Personen teilnehmen.

Aufgabenstellung AC 1: Kristalle züchten und analysieren

(für 4 TeilnehmerInnen, Arbeitskreise Prof. B. Albert, Prof. H. –D. Amberger, Prof. J. Kopf)

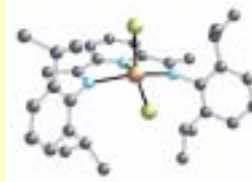
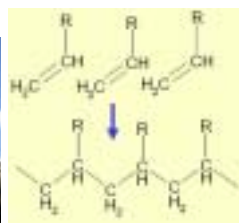
Die charakteristische Form und Farbe von Kristallen ist früher genutzt worden, um chemische Verbindungen zu identifizieren. Heute verwendet man zu diesem Zweck modernere Methoden. Im Rahmen des Schülerferienpraktikums sollen Kristalle mit besonderem Habitus gezüchtet und mikroskopiert werden. Anschließend wird eine Einkristallröntgenstrukturanalyse durchgeführt und ein Ramanspektrum aufgenommen, um die Substanz zu charakterisieren und ihren Aufbau zu verstehen.



Aufgabenstellung AC 2: Übergangsmetallkomplexe und Polymerisation

(für 4 TeilnehmerInnen, Arbeitskreise Prof. P. Burger, Prof. M. Prosenč)

Übergangsmetallkomplexe spielen eine große Rolle in der modernen industriellen Katalyse. Ein wichtiges Teilgebiet stellt hierbei die Polymerisationskatalyse dar. Im Rahmen des Projektes werden Übergangsmetallkatalysatoren synthetisiert und einfache Polymerisationsreaktionen durchgeführt und einen Einblick in die computerunterstützte Forschung (Molecular Modelling) gegeben. Vor den experimentellen Arbeiten werden die Studenten in wichtige Grundbegriffe eingeführt. Ein Überblick über die Entwicklung neuer Katalysatoren und aktuelle chemische Arbeitsweise und -technik ist das Ziel des Projekts.



Aufgabenstellung AC 3: Bestimmung von Calcium und Kupfer in Wasserproben

(für 4 TeilnehmerInnen, Arbeitskreis Prof. J.A.C. Broekaert, Dr. F. Meyberg)

Ziel des Versuches soll es sein, die Calcium- und Kupfer-Gehalte in Wasserproben zu bestimmen. Dies soll mit Hilfe der Flammen- bzw. Graphitrohr-Atomabsorptionsspektrometrie (AAS) geschehen, wobei zunächst die notwendigen theoretischen Grundlagen vermittelt werden, bevor die Kalibrier- und Probenlösungen angesetzt und analysiert werden. Es können eigene Wasserproben mitgebracht werden. Bei der Auswertung werden Fehlerquellen und Probleme der Element-Spurenanalytik diskutiert.



Aufgabenstellung AC 4: Der Weg zum Polymer ist nicht schwer! - Katalysatorsynthese für die Polymerisation

(für 4 TeilnehmerInnen, Arbeitskreis Prof. J. Heck)

Polystyrol ist ein trüber Werkstoff mit hoher Steifigkeit und Härte. Es besitzt eine geringe Zähigkeit, ist somit bruchempfindlich bei Schlagbeanspruchung und hat eine wasserhelle Transparenz.

Anwendungen von Polystyrol:



Glänzend in Form ...

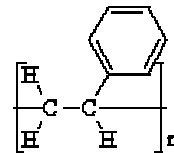


... bleibt cool ...



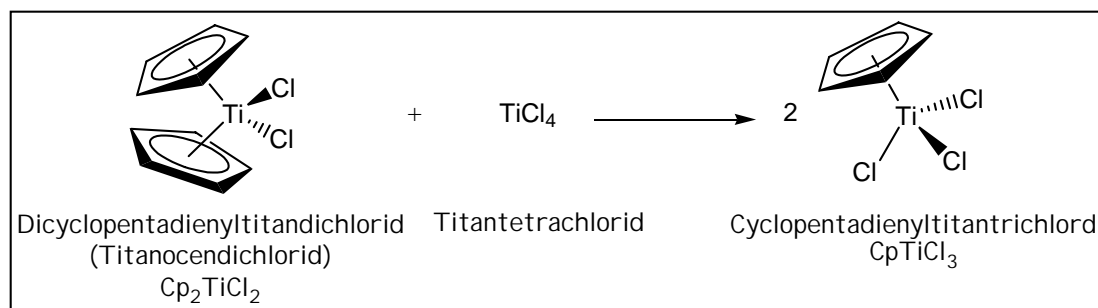
... packt Lebensmittel ein

Polystyrol ist ein Kunststoff, der seit 1930 durch radikalische Polymerisation von Styrol hergestellt wird. Gegenüber Säuren, Laugen und Alkohol ist Polystyrol beständig. Auffällig ist der brillante Oberflächenglanz.



Polystyrol

CpTiCl_3 wird als Katalysator für die Darstellung von Polystyrol (PS) eingesetzt.



Aufgabenstellung BC 1: Proteinreinigung und Proteinanalytik

(für 4 TeilnehmerInnen, Arbeitskreis Prof. U. Hahn)

Versuchsziel ist die Isolierung eines Enzyms sowie dessen enzymatischer Nachweis und Überprüfung der Reinheit. Der Versuch verdeutlicht das generelle Prinzip der Proteinreinigung aus komplexen Gemischen.

Proteine steuern komplexe Abläufe in der Zelle und werden teilweise auch als Therapeutika in der Medizin eingesetzt. Um ein Protein funktionell und strukturell zu charakterisieren, muss es aus der Zelle isoliert und gereinigt werden.

In dem vorliegenden Versuch soll die Dihydrofolatreduktase (DHFR) aus einem Zellextrakt gereinigt und analysiert werden. Dazu werden die Proteine des Zellextraktes mit einer Ionenaustauschchromatographie an einer FPLC-Anlage (Fast Protein Liquid Chromatography) getrennt. Die einzelnen Proteinfraktionen werden nachfolgend mit einem photometrischen Test auf die biologische Aktivität der DHFR überprüft. Anschließend werden die Proteine in einem Gel elektrophoretisch getrennt, mit einem Farbstoff angefärbt und so auf ihre Reinheit untersucht.

Aufgabenstellung BC 2: Isolierung von DNA aus Tomaten

(für 4 TeilnehmerInnen, Arbeitskreis Prof. U. Hahn)

Versuchsziel ist die Isolierung und Betrachtung von DNA aus Tomaten mit herkömmlichen Haushaltsmitteln. Der Versuch verdeutlicht das generelle Prinzip der DNA-Gewinnung aus Geweben.

Desoxyribonucleinsäure (DNA) ist ein natürlicher Bestandteil unseres täglichen Speiseplans. Pro Tag nehmen wir etwa 1-2 g dieser Trägersubstanz von Erbinformation auf -komplette Genome von Gemüse-, Obst- und Getreidesorten sowie verschiedener tierischer Herkunft. Doch wie sieht DNA aus?

Im vorliegenden Versuch wird DNA aus Tomaten isoliert und sichtbar gemacht. Dazu wird zunächst das Pflanzengewebe mechanisch zerkleinert.

Die nachfolgende Zugabe von Spülmittel und Kochsalz bewirkt eine Zerstörung der Zell- und Kernmembranen. Die Zellfragmente werden anschließend durch Filtration abgetrennt - zurück bleiben die gelösten Proteine und DNA. Durch Behandlung mit einem speziellen Proteaseenzym werden die isolierten Proteine abgebaut. Nach Zugabe von Ethanol fällt die DNA aus und kann um eine Impfmöuse gewickelt, aus der Lösung gezogen und betrachtet werden. Das auf diese Weise isolierte Material ist jedoch noch mit Proteinen und RNA (Kopien der DNA) verschmutzt. In einem Reinigungsschritt wird die isolierte DNA elektrophoretisch getrennt und die Konzentration photometrisch bestimmt.

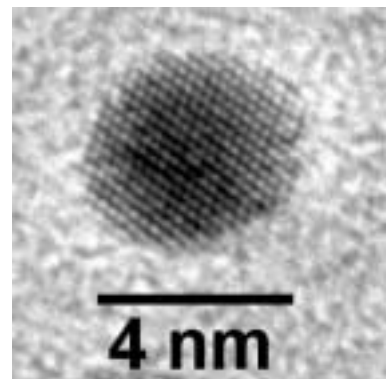


Aufgabenstellung PC 1: Nanogold aus dem Reagenzglas

(für 4 TeilnehmerInnen, Arbeitskreis Prof. H. Weller)

Im Größenbereich von einigen Nanometern (ein Nanometer = ein millionstel Millimeter) ändern sich die Materialeigenschaften von Festkörpern sehr drastisch gegenüber herkömmlichen Stoffen. Nanopartikel erobern deshalb auch gegenwärtig zahlreiche Anwendungsgebiete in Elektronik, Optik, Katalyse, Materialforschung sowie in biochemisch-medizinischer Diagnostik und Therapie.

Im Rahmen des angebotenen Versuchs werden im Labor nanometergroße Goldpartikel in Lösung präpariert. Die Farbe solcher Lösungen ist tiefrot und unterscheidet sich damit sehr deutlich von großen Goldpartikeln. Die Teilchen werden mithilfe von Absorptionsspektroskopie, Röntgenbeugung und hochauflösender Elektronenmikroskopie untersucht. Durch die atomare Ortsauflösung letzteren Verfahrens kann die Kristallstruktur der Partikel direkt abgebildet werden.



Aufgabenstellung PC 2: Farbige Mikrocapseln

(für 3 TeilnehmerInnen, Arbeitskreis Prof. S. Förster)

Vesikel stellen interessante Systeme für kosmetische und pharmazeutische Anwendungen dar.

Durch ihre hohlkugelartige Struktur eignen sie sich zum Wirkstofftransport und als Wirkstoffdepot. In der molekularen Medizin eröffnen sie die Möglichkeit, schwerlösliche und empfindliche Arzneistoffe in die Zielorgane zu transportieren. Durch ihre Depotfunktion können Arzneien über einen gewissen Zeitraum kontinuierlich zugeführt werden.

In diesem Versuch sollen Liposomen auf verschiedene Arten hergestellt werden und die Einkapselung verschiedener Stoffe modellhaft an Farbstoffen untersucht werden.



Aufgabenstellung OC 1: Synthese und Untersuchung eines Flüssigkristalls

(für 2 TeilnehmerInnen, Arbeitskreis Prof. V. Vill)

Im Praktikum soll ein Flüssigkristall (Cholesterylcarbonat) hergestellt werden, welcher zur Temperaturmessung (Farbskala) oder als Effektfarbe in Kosmetika angewendet wird. Es beinhaltet die synthetisch präparative Tätigkeit, Reinigung und Isolation mit Hilfe der Säulenchromatographie bzw. durch Umkristallisation sowie die mikroskopische Untersuchung der Phasenumwandlung des Flüssigkristalls.



Natürlicher Käfer mit seiner natürlichen Farbe, verglichen mit einem künstlichen Käfer eingefärbt mit einer flüssigkristallinen Reflektivfarbe auf Basis nachwachsender Rohstoffe (Bild: BASF-AG)

Aufgabenstellung OC 2: Spektroskopische Strukturaufklärung organischer Moleküle

(für 2 TeilnehmerInnen, Arbeitskreis Prof. C. Meier)

Die Strukturaufklärung ist ein wesentlicher Teil der Tätigkeit eines organisch präparativ arbeitenden Chemikers. Im Projekt werden von ausgewählten organischen Verbindungen Spektren aufgenommen und interpretiert. Es werden somit die modernen Methoden der Infrarotspektroskopie (IR), der Kernresonanzspektroskopie (NMR) und der Massenspektrometrie (MS) kennen gelernt.

Aufgabenstellung OC 3: Qualitative organische Analyse

(4 Teilnehmer, Ausbildungslabor Fr. Lingenober & Fr. Dockweiler)

Bei einer qualitativen Untersuchung prüft man eine unbekannte Substanz auf bestimmte Elemente z.B. Stickstoff, Chlor oder Schwefel. Nicht nur Elemente können nachgewiesen werden, sondern auch funktionelle Gruppen, die zur Aufklärung von Strukturen eines Stoffes beitragen können.



Die Nachweisreaktionen sind einfach und schnell mit Hilfe von Farbreaktionen, Fällungsreaktionen und mit einem spektakulären Natriumaufschluss durchzuführen. Jeder Teilnehmer erhält eine Probe, die auf die einzelnen Elemente und Gruppen geprüft werden soll. Die Nachweisverfahren werden vorher kurz erläutert.



Aufgabenstellung OC 4: Synthese von Kohlenhydratbausteinen

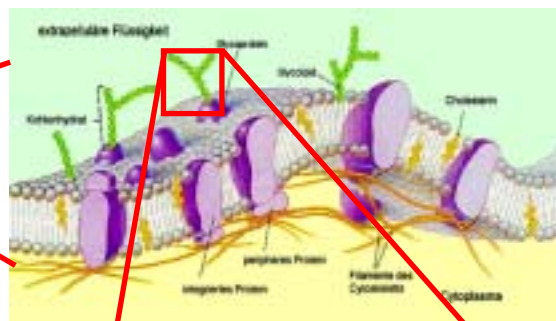
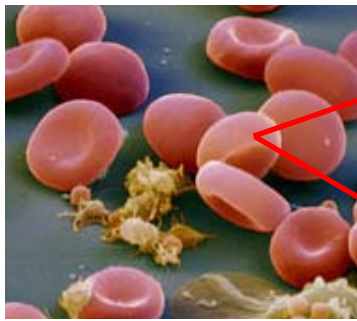
(für 6 TeilnehmerInnen, Arbeitskreis Prof. J. Thiem)

Zucker schmecken nicht nur süß oder dienen in Form von Stärke als Energiespeicher und -lieferant, sondern spielen eine essentielle Rolle bei der Erkennung und Unterscheidung von verschiedenen Zelltypen und sind damit von biologischem und medizinischem Interesse.

Jeder kennt die unterschiedlichen Blutgruppen Typen A, B und 0.

Es befinden sich auf der Zelloberfläche der roten Blutkörperchen (Erythrocyten) individuelle Glycoproteine, die sich in der Struktur und Zusammensetzung der Kohlenhydrate unterscheiden.

Antikörper des Immunsystems können so die die Blutgruppentypen unterscheiden. Wird z.B. das Blut verschiedener Blutgruppen gemischt, kommt es zur Verklumpung der Zellen durch die Bindung der Antikörper. Vor der Entdeckung der Blutgruppen waren daher Bluttransfusionen eher zufällig erfolgreich und endeten oft tödlich.



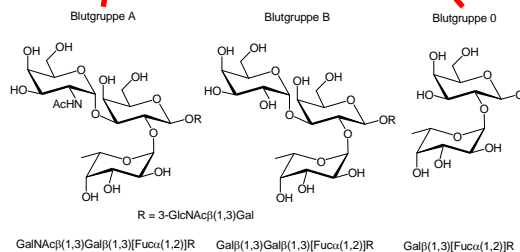
Abkürzungen:

Fuc = L-Fucose

Gal = D-Galactose

GalNAc = N-Acetyl-galactosamin

GlcNAc = N-Acetyl-glucosamin

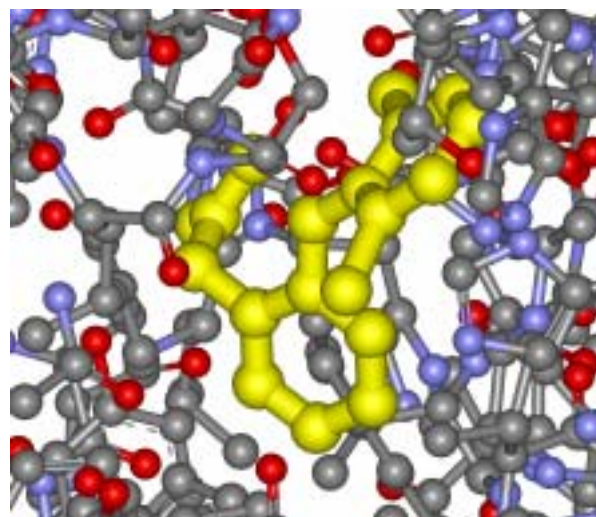


Die Strukturaufklärung und Synthese von natürlichen und unnatürlichen Zuckern (Kohlenhydraten) wird intensiv erforscht und kann zur Entwicklung von modernen Medikamenten beitragen. In diesem Versuchsteil sollen Zuckermoleküle chemisch verändert werden um so später Eingang in die wissenschaftliche Arbeit zu finden.

Aufgabenstellung OC 5: Wie werden neue Arzneimittel entworfen? NMR-Spektroskopie und Molecular Modelling am Beispiel des Schmerzmittels Voltaren©

(für 4 TeilnehmerInnen, Arbeitskreis Prof. B. Meyer)

Neue Arzneimittel zu entwerfen bedeutet im Regelfall kleine Moleküle zu finden, die die mit großen Proteinen Wechsel wirken. Hierzu bedient man sich einer Reihe von Verfahren, wie z.B.: Röntgenstrukturanalytik, NMR-Spektroskopie, Computerchemie, Oberflächenplasmonenresonanz und anderer. Hier werden sie das Zusammenspiel von NMR Spektroskopie und Computerchemie (Molecular Modelling) sehen und ausprobieren können. Mit NMR Spektroskopie können sowohl Strukturen von Molekülen bestimmt werden als auch die Wechselwirkung der Moleküle miteinander. Grundlage ist die Tatsache, dass viele Atomkerne ein magnetisches Moment haben. In ein sehr starkes, supraleitendes Magnetfeld gebracht, erhält man Informationen über die chemische Umgebung eines Atoms und seine räumliche Nachbarschaft zu anderen Atomen im Molekül. Gezeigt werden Grundlagen und einfache Versuche, sowie die Interpretation von NMR-Spektren am Beispiel Voltaren©. Daten aus der NMR Spektroskopie werden dann benutzt, um mit computergenerierten Strukturen die Bindungen der kleinen neuen Wirkstoffe einen die großen Proteinenzepatoren zu optimieren. Diese Verfahren werden am Beispiel Voltaren© und seinem Wirkort, dem Protein COX-2, erläutert.



In Gelb ist das Wirkmolekül (Voltaren, Diclofenac, ein Schmerzmittel) eingeschlossen in das Rezeptorprotein gezeigt.

Sie werden Gelegenheit haben, sowohl mit der Modeling Software als auch an NMR Gerät dieses Verfahren kennen zu lernen.