Station Oberfläche

Proteinen unterschiedlich darstellen

Proteine können auf unterschiedliche Weise abgebildet werden. Bei einer dir bestimmt bekannten Art werden Proteine und ihre Bindungspartner („Liganden“) durch geometrische 2D-Formen dargestellt. Vor allem für das Schlüssel-Schloss-Prinzip sind solche Darstellungsformen, wie in Abbildung 1, typisch.

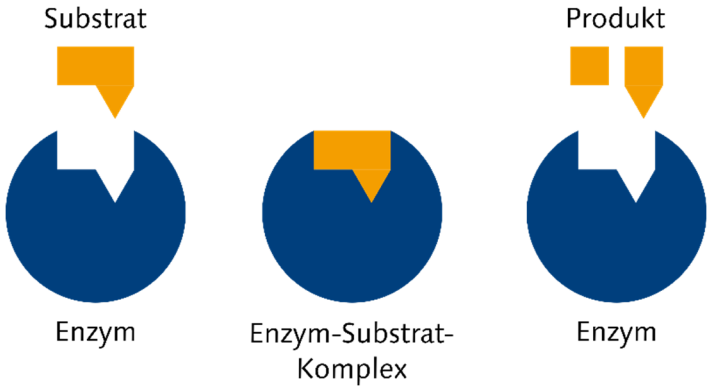


Abb. 1: Schematische Abbildung des Schlüssel-Schloss-Prinzips (angelehnt an Fischer 1894).

Eine mögliche 3D-Darstellung von Proteinen siehst du auf dem Computerbildschirm dargestellt. Dabei werden die Proteine mit den Atomen, aus denen sie aufgebaut sind, abgebildet und dadurch ihre dreidimensionale Form sichtbar gemacht. Diese 3D-Darstellungen können einerseits in Bildern, andererseits auch als Tasterfahrung eingesetzt werden.

In dieser Station hast du die Möglichkeit diese beiden Varianten kennenzulernen und zu vergleichen.

Aufgabe zum Ertasten

1. **Ermittle** mithilfe der Haptik-Hardware die Bindestelle des Proteins. **Greife** dazu den Griff des Hardware-Arms und **bewege** ihn so, dass du den Liganden über die Oberfläche des Proteins bis zur Bindestelle führst.
2. **Erläutere**, welche Aspekte von Ligand-Proteinen-Interaktionen mithilfe dieser fühlbaren Darstellung erklärt werden können.

CC BY NC SA
Clemens Frank
Sep. 2026

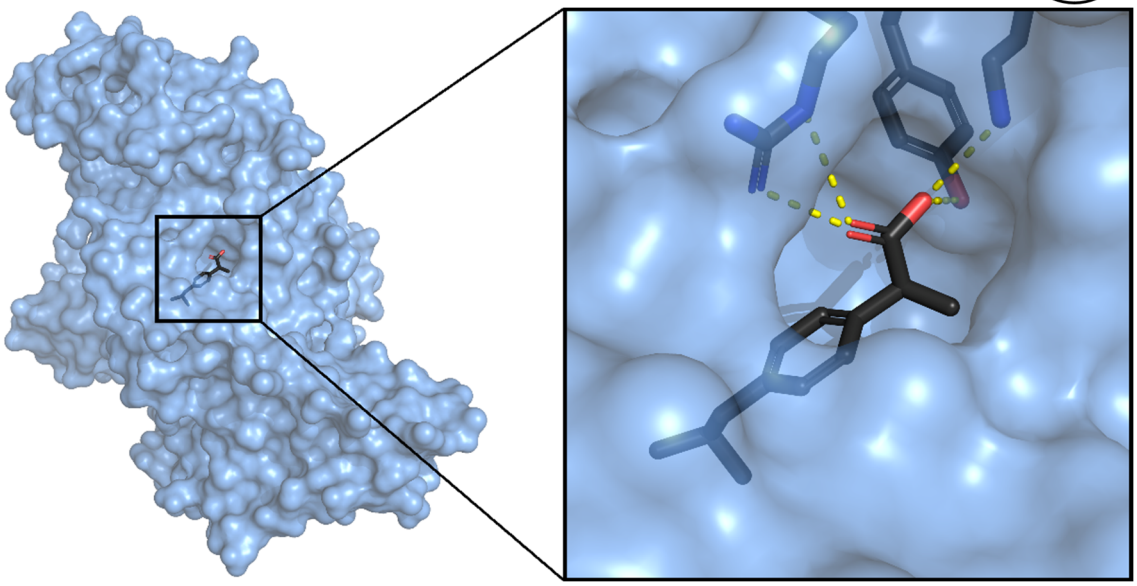


Abb. 2: Ibuprofen im Albumin-Protein in der Gesamtansicht sowie Interaktionen in der Bindetasche von Albumin.

Aufgabe zu Oberflächen-Darstellungen

Erläutere, welche Aspekte von Ligand-Proteinen-Interaktionen mithilfe dieser visuellen Darstellung in Abb. 2 erklärt werden können.

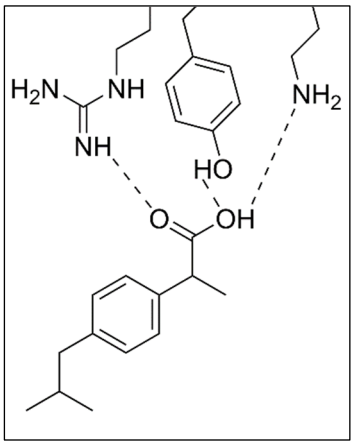


Abb. 3: Skelettformeln von Ibuprofen und Aminosäuren-Bausteine von Albumin in demselben Ausschnitt wie in der obenstehenden Abb**. 2**.

Zusatzaufgabe

Analysiere mithilfe von Abb**. 3:** Skelettformeln von Ibuprofen und Aminosäuren-Bausteine von Albumin in demselben Ausschnitt wie in der obenstehenden Abb**. 2**,

CC BY NC SA
Clemens Frank
Sep. 2026

Aufgaben zum Vergleichen

Vergleiche, welche Vor- und Nachteile die verschiedenen Darstellungen haben.

geometrische 2D-Bilder	
Vorteile:	Nachteile:
3D-Modell zum Ertasten	
Vorteile:	Nachteile:
Bilder von 3D-Interaktionen	
Vorteile:	Nachteile:

Tipp:

Als Kriterien für den Vergleich kannst du Übersichtlichkeit, Detailgrad, räumliches Passen, chemische Interaktionen, Verständlichkeit und Übertragbarkeit auf andere (fachliche) Zusammenhänge heranziehen.

Aufgabe zu Medikamenten

Begründe mündlich, dass es für ein umfassendes Verständnis der Wirkung oder der Interaktionen von den Wirkstoffen in Medikamenten hilfreich ist, unterschiedliche Darstellungen von Proteinen und Liganden zu kennen.

CC BY NC SA
Clemens Frank
Sep. 2026

Konzentration im Blut

Mithilfe der Simulation konntest du nachvollziehen, dass Ibuprofen an Albumin, also ein Protein im Blut, bindet. Dabei hast du quasi eine Momentaufnahme der Verteilung betrachtet. Im Körper finden gleichzeitig Verteilung, Verstoffwechselung und Ausscheidung statt. Die Konzentration von Ibuprofen im Blut ist also nicht konstant.

Die zeitliche Veränderung der im Blut vorliegenden Konzentration an Wirkstoff lässt sich als Graph darstellen. Der zeitliche Verlauf der Konzentration wird maßgeblich beeinflusst durch die anderen Phasen des LADME-Modells.

Die Freisetzung (*Liberation*) und Aufnahme (*Absorption*) von Wirkstoffen kann durch einen s-förmigen, steilen Anstieg beschrieben werden. Dieser ist in den ersten 1,5 Stunden im Graphen zu erkennen. Die Verstoffwechselung (*Metabolisierung*) und Ausscheidung (*Exkretion*) verläuft wie eine Zerfallsfunktion. Die Kurve fällt zunächst schnell und wird immer flacher, wie beispielsweise ab 1,5 Stunden im Graphen.

Bis zum Höhepunkt steigt die Konzentration stetig an, anschließend fällt sie stetig wieder ab – sofern keine weitere Tablette genommen wird.

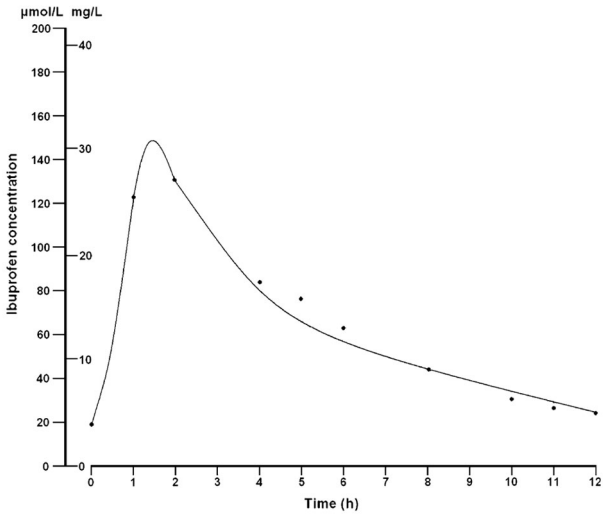


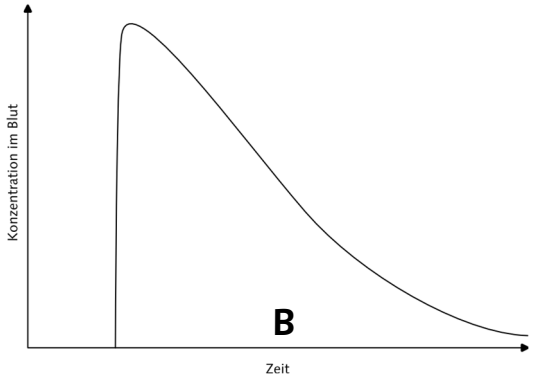
Abb. 4: Konzentration von Ibuprofen im Blut pro Zeit (in Rainsford, 2009, S. 289).

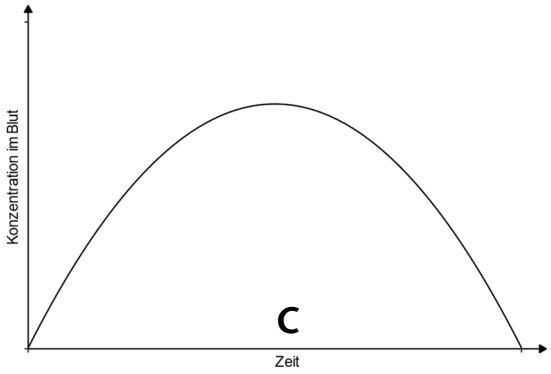
CC BY NC SA
Clemens Frank
Sep. 2026

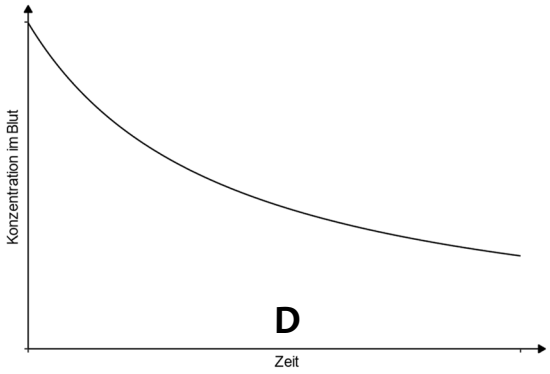
Aufgaben zu Graphen

Nenne für jeden der Graphen in Stichpunkten einen berücksichtigten und einen nicht berücksichtigten Aspekt der korrekten Kurve.









CC BY NC SA
Clemens Frank
Sep. 2026

Aufgaben zu individuellen Konzentrationsverläufen

Zwei Personen nehmen zur gleichen Zeit dieselbe Dosis Ibuprofen ein. Bei einer Blutuntersuchung zeigt sich, dass sich die Wirkstoffkonzentration im Verlauf der Zeit unterscheidet.

1. **Formuliere** eine Vermutung zu einem individuellen Faktor, der die Konzentrationsverläufe beeinflussen könnte.
2. **Zeichne** zwei Konzentrationsverläufe in das Koordinatensystem, deren Unterschied zu deiner Vermutung passt.



3. **Erläutere** den Zusammenhang zwischen deiner Vermutung und den dargestellten Verläufen.
4. **Begründe**, warum derselbe Konzentrationsverlauf nicht für alle Menschen gelten muss.

CC BY NC SA

Rezeptor-Bindung von Nikotin

Nikotin wirkt im Nervensystem und im Gehirn, weil seine Molekülstruktur dem körpereigenen Botenstoff Acetylcholin ähnelt. Dadurch kann Nikotin an Rezeptoren für Acetylcholin binden, die im synaptischen Spalt vorhanden sind. Diese räumliche und chemische Passung führt dazu, dass der Rezeptor zunächst aktiviert und anschließend blockiert wird. Weil Nikotin an diese Rezeptoren für Acetylcholin binden kann, werden sie auch nikotinische Acetylcholin-Rezeptoren (*nAChR*) genannt. Da diese Art der Rezeptoren in verschiedenen Zelltypen vorliegt, verläuft die Wirkung von Nikotin über zwei unterschiedliche Mechanismen:

1. Nikotin bindet an Rezeptoren auf Neuronen, die für die Ausschüttung von Dopamin verantwortlich sind. Diese Neuronen feuern häufiger und setzen mehr Dopamin frei, was als angenehm erlebt wird.
2. Nikotin bindet auch an Rezeptoren auf Neuronen, die die Ausschüttung von Dopamin hemmen können. Da Nikotin aber besonders lange an diese Rezeptoren gebunden bleibt, werden sie blockiert und die Neuronen sind in ihrer Wirkung eingeschränkt. Die Ausschüttung von Dopamin bleibt über einen längeren Zeitraum erhöht.

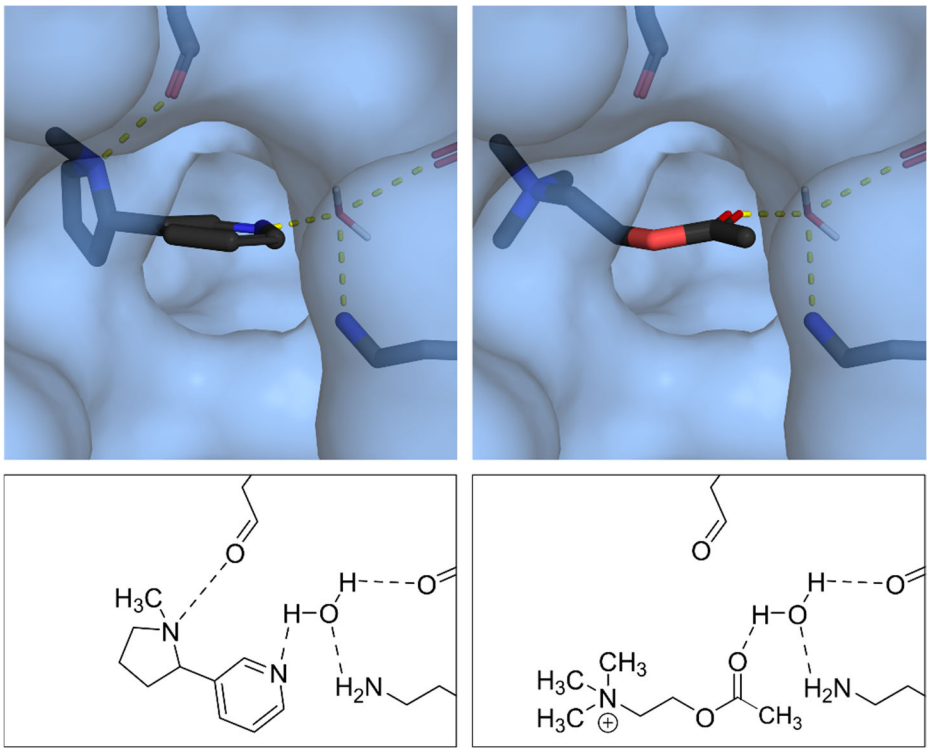


Abb. 5: Nikotin (links) und Acetylcholin (rechts) gebunden an einen Rezeptor (nAChR) im Nervensystem. Wasserbrücken-Interaktionen sind als gelbe Striche darstellt.

CC BY NC SA
Clemens Frank
Sep. 2026

Aufgabe zur Rezeptorbindung

Vergleiche die Interaktion von Nikotin und Acetylcholin mit dem Rezeptor, die in Abb. **5** dargestellt sind, in Bezug auf Gemeinsamkeiten und Unterschiede.

Nikotin im Rezeptor vs. Acetylcholin im Rezeptor	
Gemeinsam-keiten	
Unterschiede	

Aufgabe zu Struktur und Wirkung

Stelle eine Hypothese auf, wie sich die Wirkung von Nikotin durch die molekularen Strukturen von Nikotin und Acetylcholin erklären lassen.

CC BY NC SA
Clemens Frank
Sep. 2026

Zum Autor



Clemens Frank studierte nach seinem Abitur zunächst im Bachelor an der Freien Universität Berlin Chemie und Mathematik für das Lehramt. Nach seinem Masterabschluss an der Christian-Albrechts-Universität zu Kiel ebenfalls in den Fächern Chemie und Mathematik für das Lehramt knüpfte er nahtlos mit einem Promotionsstudium unter Prof. Dr. Ilka Parchmann am IPN – Leibniz-Institut für die Pädagogik der Naturwissenschaften und Mathematik in Kiel an. In seinem Projekt entwickelte er das vorliegende Material im Rahmen eines außerschulischen Lernangebotes in der Kieler Forschungswerkstatt.

CC BY NC SA