

Cvičení – databáze

PubChem - <http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/>

- 1) Najděte v databázi informace o kofeinu.
 - a. Jaké další názvy se používají pro kofein?
 - b. Jaký je InChI a SMILES zápis?
 - c. Na co se užívá?
 - d. Kdo by kofein neměl užívat?
 - e. Jaké jsou vedlejší účinky?
 - f. Na jaké cíle tato látka útočí?
 - g. Jak rychle nastupuje tolerance vůči látce?
 - h. Jakým způsobem dochází k exkreci z metabolismu?
 - i. Jakou má barvu?
 - j. Jaký náboj bude mít při pH 7 (dle pKa)?
- 2) Najděte kofeinu podobné struktury.
- 3) Najděte strukturu s naftalenovým kruhem a alespoň jednou rotovatelnou vazbu.
- 4) Najděte strukturu, která bude podobná naftalenovému kruhu, s dodatečnými filtry jako v předchozím případě.
- 5) Na naftalenu si vyzkoušejte rozdíl mezi hledáním substruktury, superstruktury a 3D podobnosti. K jakým výsledkům v těchto případech docházíte?
- 6) V rámci **PubChem Bioassays** naleznete prokázané COX2 inhibitory s dostatečnou aktivitou (COX2 enzymy hrají svou roli při vnímání bolesti).

ChEBI - <http://www.ebi.ac.uk/chebi>

- 1) Najděte v databázi informace o kofeinu.
 - a. Jaké má biologické role?
 - b. Existuje protein, který by vytvářel resistenci na kofein?
 - c. Jaké má NMR spektrum?
 - d. Jakých biochemických reakcí se účastní?

ChEMBL – <https://www.ebi.ac.uk/chembl/db/>

- 1) Najděte kofein.
 - a. Jaké má kofein SMILES? Shoduje se se SMILES zápisem v PubChem databázi?
 - b. Jaké vlastnosti má tato látka „approved“?
 - c. Splňuje kofein Lipinského pravidlo pěti?
 - d. Jaké typy podání jsou možné?

Drugbank - www.drugbank.ca

- 1) Najděte kofein.
 - a. jaké má metabolity?
 - b. jakým transportérem je přenášen?
 - c. s jakými dalšími látkami bývá často prodáván?
 - d. v které klinické zkoušce kofein propadl už v první fázi?

ChemSpider - www.chemspider.com

- 1) Najděte kofein.
 - a. Jaké fyzikálně chemické vlastnosti má?
 - b. Jaké má IR a NMR spektrum?
 - c. Kdo ho prodává?
 - d. V kterých strukturách proteinů se dá najít?
 - e. Jak se při práci s kofeinem chovat v laboratoři (Safety data)?
 - f. Vyhledejte látky se stejným sumárním vzorcem.
 - g. Vyhledejte podobné látky.
 - h. Spočítejte vlastnosti pro kofein v jednotlivých predikčních softwarech (ACD, ChemAxon, EPIsuite) a porovnejte je s experimentálními hodnotami. Kterému predikčnímu programu se dá věřit nejvíce?

Chemicalize.org - <http://www.chemicalize.org>

- 1) Najděte kofein.
 - a. Jaké možné tautomery může tvořit?
 - b. Při jakém pH bude nejvíce hydrofilní (logD)?
 - c. Jaký náboj bude mít při pH 7 a při pH 14?

PDB – www.rcsb.org

- 1) Najděte strukturu Na/K – ATPázy.
 - a. Uveďte PDBID její nejlepší struktury.
 - b. Z jakého organismu pochází?
 - c. Jaké obsahuje ligandy?
 - d. Kolik struktura obsahuje řetězců?
 - e. Jakou aminokyselinou jednotlivé peptidické řetězce začínají?
 - f. Jakou sekundární strukturu má převážně gamma podjednotka?
 - g. Na základě anotací odhalte, jakou funkci tento protein má.
 - h. Při jakém pH a na jakém přístroji byla struktura vyřešena.
- 2) S kterými proteiny byl vykrystalizován navrhovaný olomoucký lék na rakovinu roskovitin?
 - a. Uveďte jejich PDBID.
 - b. Najděte jeho 2D strukturu.
 - c. S kterými aminokyselinami interaguje a jakým typem interakce.
 - d. V jakých koncentracích byl nalezen účinný? (IC₅₀)