

# Welcher Wirkstoff ist der beste?-Teil I

## Lösung:

Abbildung 14 zeigt für den weißen Wirkstoff den kürzesten Weg zum Target und den kürzesten Weg zum Off-Target. Da die weißen Barrieren keine Hindernisse für den weißen Wirkstoff darstellen, kann man sie in der Darstellung weglassen. Der weiße Wirkstoff benötigt im Idealfall nur vier Schritte zum Target. Allerdings erreicht er das Off-Target auch mit nur vier Schritten.

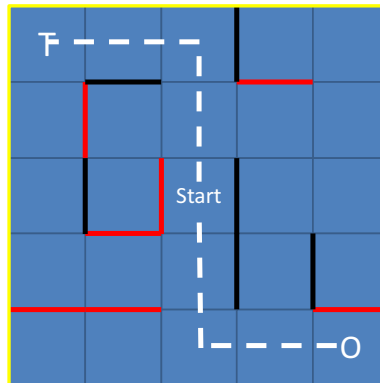
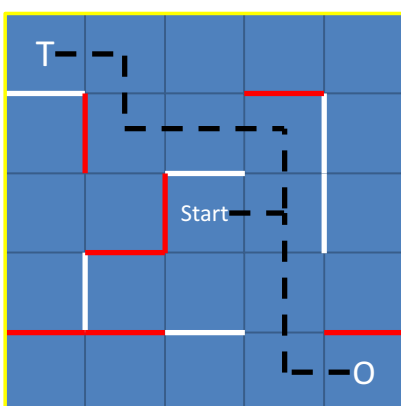
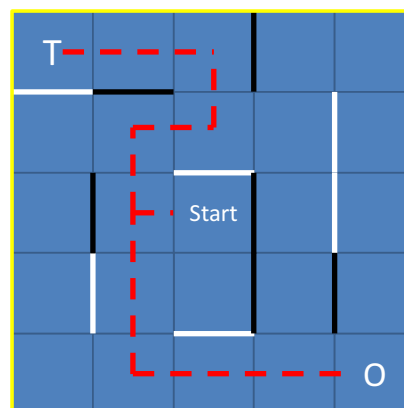


Abbildung 14: Für den weißen Wirkstoff stellen die dargestellten Wege die kürzeste Verbindung zum Target bzw. zum Off-Target dar.

Entsprechend stellen Abbildungen 15 (a) und (b) die kürzesten Wege für den roten bzw. schwarzen Wirkstoff dar. Der schwarze Wirkstoff erreicht das Target mit sechs Schritten, zum Off-Target benötigt er nur vier Schritte. Der rote Wirkstoff benötigt sowohl zum Target also auch zum Off-Target sechs Schritte.



(a) Schwarz



(b) Rot

Abbildung 15: Kürzeste Wege zum Target bzw. zum Off-Target.

Basierend auf diesem Ergebnis könnte man annehmen, dass der schwarze Wirkstoff der schlechteste ist, da er weniger Schritte zum Off-Target als zum Target benötigt. Aber wie du bereits weißt, erfolgen die Bewegungen eines Wirkstoffs wie zufällig. Es

# Welcher Wirkstoff ist der beste?-Teil I

genügt also nicht, nur die kürzeste Verbindung zum Target bzw. zum Off-Target zu betrachten, denn vermutlich wird der Wirkstoff einen ganz anderen Weg wählen. Den Zufall darfst du bei der Analyse eines Wirkstoffs nicht außer Acht lassen. In den nächsten beiden Aufgaben erfährst du, wie du die Wirksamkeit der Wirkstoffe mit Hilfe der Kommittorfunktion vergleichen kannst.