# Begrebsordbog

| **Begreb**  | **Forklaring**  |
| --- | --- |
| Analog | Et stof, der ligner et andet stof, men som ikke er identisk med det andet stof.  |
| Affinitet | Et udtryk for to stoffers tilbøjelighed til at interagere med hinanden. Jo højere affinitet, jo større er sandsynligheden for, at der vil ske en reaktion. |
| Bindingslommen | Området på et enzym, hvor et substrat (reaktant) binder. Dette område har typisk en meget specifik form, der matcher bestemte substrater. |
| Bulky  | Oversættes til omfangsrig. Upolære aminosyrers sidegrupper kan være bulky ved, at sidegruppen fylder med carbonkæder som fx ses i isoleucin, fenylalanin, valine, tryptophan, prolin, valin, leucin, methionin.  |
| COX  | Forkortelse for cyclooxygenase. COX er et enzym, der er ansvarlig for biosyntesen af prostanoider. COX findes i to isoformer, COX-1 og- COX-2.  |
| Dipol-Dipol interaktioner | En interaktion mellem polære molekyler. Interaktionen kan enten være med tiltrækkende eller frastødende kræfter. Det er en svag interaktion sammenlignet med ionbindinger. Hydrogenbindinger er en form for dipol-dipol interaktion.  |
| Docking | En molekylær modelleringsteknik, der bruges til at forudsige, hvordan et protein (enzym) interagerer med et molekyle (ligand).  |
| Elektronegativitet | Et mål som beskriver et atoms evne til at tiltrække og fastholde elektroner i en kemisk binding. For eksempel er fluor et meget elektronegativt atom, mens et atom som natrium ikke er. |
| Enzym | Enzymer er proteiner som dannes af levende celler og katalyserer kemiske reaktioner. Proteiner er opbygget af aminosyrer, og interaktionen imellem liganden og den specifikke aminosyre afgører, om enzymet kan udøve sin enzymatiske effekt.  |
| Hydrogenbindinger | En elektrostatisk tiltrækningskraft mellem et hydrogen atom og et mere elektronegativt atom såsom oxygen, nitrogen eller fluor. Forstærkes af ladninger. |
| Inhibitor | En hæmmer der vil blokere en proces og dermed fx forhindre et enzym i at udøve sin effekt.  |
| Intermolekylære kræfter | Kræfter mellem atomer og molekyler, der holder dem sammen, men som ikke er kemiske bindinger (fx en kovalent binding). Eksempler på intermolekylære kræfter er ionbindinger, London-bindinger og dipol-dipol interaktioner.  |
| Ionbindinger | En stærk elektrostatisk tiltrækningskraft mellem negativt og positivt ladede grupper. |
| Kovalent binding | En binding mellem to atomer, hvor de “deler” elektronerne. Kan også kaldes elektronpar-binding.  |
| London-bindinger  | De upolære dele i molekylet, hvor der er en konstant vekselvirkning med nabomolekylerne, som danner kortvarig polaritet. Bindingernes styrke afhænger af antallet af elektroner , da flere elektroner giver flere muligheder vekselvirkning. Kaldes også van der Waals kræfter.  |
| Ligand | En ion eller et molekyle, der for at tjene et biologisk formål, danner et kompleks ved at binde sig med et biomolekyle  |
| Modificere | Give noget en anden form eller andet indhold ved at foretageændringer. |
| NSAIDs | En lægemiddelgruppe der virker antiinflammatorisk, analgetisk (smertestillende) og antipyretisk (febernedsættende). Du kender måske eksemplerne acetylsalicylsyre, ibuprofen, celecoxib og flurbiprofen. NSAIDs står for *Non-steriodal Anti-inflammatory Drugs*.  |
| PDB-kode | Koder for den krystal struktur (og evt. bundet ligand), du ønsker at docke dit molekyle i. Koden kommer fra Protein Data Banken (PDB). |
| Pose  | Den foreslåede bindingstilstand du får efter at have docket dit molekyle i et protein. |
| Prostaglandiner | Er kemiske forbindelser, der spiller en afgørende rolle ved at regulere mange processer, herunder inflammation, smerte, blodcirkulation og beskyttelse af mavetarmslimhinden.  |
| Prostanoider | Er en overkategori, hvor prostaglandiner hører under.  |
| Poster  | En måde du kan fremvise den videnskabelige proces og de tilhørende resultater. Minder om en plakat.  |
| RCSB | Forkortelse for *Research Collaboratory for Structural Bioinformatics*. Det er den hjemmeside, hvor du kan analysere 3D-strukturen af celecoxib i hhv. COX-1 og COX-2.  |
| Score | En score efter docking er resultatet, som kan bruges til at sammenligne ligandernes bindingsaffiniteter og bindingsenergier i det pågældende protein. En højere negativ score indikerer højere affinitet. |