

„Es soll etwas gegen Alzheimer auf dem Markt geben.“ – „Ganz recht, das ist ein Acetylcholinesterase-Hemmer, ich glaube Tacrin mit bürgerlichem Namen, Produktname Cognex.“ – „Da sollten wir uns schlau machen – recherchieren Sie mal!“

Man kann sich auf den weiten Weg durch die Literatur über Medline begeben... ergibt 16127 unsortierte Einträge unter dem Stichwort Acetylcholinesterase. Dann vielleicht doch lieber SwissProt oder über die Substanz? Oder man macht es sich leicht und begibt sich an der Hand von ESTHER in das Land der Esterasen. Außer den großen, allumfassenden Datenbanken gibt es spezialisierte Web-Sites, bei denen man sozusagen vom Traiteur vorsortierte, fein säuberlich aufbereitete Speisen bekommt – z. B. bei ESTHER.^[1, 2] Dahinter verbergen sich „ESTerases, α/β -Hydrolase Enzymes and Relatives“. Ein Inhibitor für eine davon ist bis heute das einzig zugelassene Medikament bei Alzheimer. Womit wir wieder bei der Eingangsfrage wären.

ESTHER gestattet es, sehr schnell umfassen-

de Informationen zum Thema zu sammeln. Gleich auf der Titelseite gibt es neben einer nach Sachgebieten sortierten Übersicht auch eine Suchmaske, die uns sofort zu einem ganzen Satz grundlegender nützlicher Informationen zu der gesuchten Substanz weiterleitet (Abbildung 1). Weiter erfahren wir den Verbindungstyp, nämlich ein Acridin – einen Klick weiter gibt es eine Liste weiterer Acridin-Hemmer. Sind wir an kinetischen Parametern interessiert, können wir auch diese tabellarisch aufbereitet finden. Für eine große Zahl von mutierten Enzymen lassen sich so Testergebnisse und -bedingungen ansehen. Ruft man das mitgelieferte Zitat ab, gibt es den Link zum Abstract (etwas irreführenderweise unter „Long Text“), aber auch zum Medline-Eintrag; auf der Autorenliste kann man erfahren, was sie oder er noch auf diesem Gebiet publiziert hat und bekommt häufig auch die Adresse. Der Weg zu den dreidimensionalen Strukturen ist nicht weit.

Kurzum: ESTHER ist sehr nützlich. Dafür sprechen nicht nur mehr als 1000 Zugriffe täglich, sondern vor allem die hohe Zahl von etwa 500 „Stammkunden“, die damit immer wieder gezielte Suchen durchführen. Der Nutzen ergibt sich durch die große Informationsmenge, vor allem aber durch die intensiven Verknüpfungen. Möglich gemacht wird dies durch das von Jean-Thierry Mieg

(CNRS Montpellier) und Richard Durbin (Sanger Center, Cambridge) für ein Genomprojekt entwickelte System, das sich inzwischen zum Standardformat für bald 100 spezialisierte Datenbanken gemausert hat.^[3] ESTHER hat zwar ebenfalls einen Ausgangspunkt in der Molekularbiologie, aber davon merkt man als Nutzer aufgrund der mustergültigen Verknüpfung der Objekte nicht viel. Zu bemängeln wäre, dass für den Laien undurchsichtig ist, welche Vorzüge die einzelnen Formatmöglichkeiten bieten und dass manche Vorteile sich erst entfalten, wenn man mit mehreren Fenstern gleichzeitig arbeitet. Dies macht die Sache für Experten sehr interessant, und wem es über das Netz nicht schnell oder nicht diskret genug ist, kann sich den gesamten Datenbestand auch nach Hause holen (<ftp://ftp.toulouse.inra.fr/pub/esther/>).

ESTHER ist mir sympathisch, weil alles so unscheinbar daherkommt. Das mag als „Bleiwüste“ verpönt sein, aber es lässt den unbedingten Willen erkennen, nützliche Information zu verbreiten: von Wissenschaftlern für Wissenschaftler. Arnaud Chatonnet, zusammen mit Xavier Cousin vom INRA in Montpellier Urheber der Site, sagt, er sei zufrieden, wenn ESTHER läuft und viel Besuch bekommt. Weit und breit keine blinkenden Banner oder rotierenden Logos. Dafür empfängt einen auf der Startseite ein Zitat von Racine. So ist ESTHER. Klicken Sie doch einmal rein!

Christoph Weise
Institut für Chemie
der Freien Universität Berlin

ESTHER Database


 agro
AGRO-Pharmaceuticals


 INRA
INSTITUT NATIONAL RECHERCHE AGRICOLE

[Table of contents](#) / [About Us](#) / [Tables](#) / [CONTACT](#) / [Database](#) / [Index](#) /
[Molecules](#) / [Kinetics](#) / [Descriptive](#) / [Siderological](#) /
[Allosteric](#) / [Descriptive](#) / [Acetylcholinesterase](#) / [contents](#) /

[Home](#) / [Comments](#) / [Submissions](#)

 [PDF](#)
 [Word](#)
 [Excel](#)
 [PowerPoint](#)

[Table of contents](#) / [About Us](#) / [Tables](#) / [CONTACT](#) / [Database](#) / [Index](#) /
[Molecules](#) / [Kinetics](#) / [Descriptive](#) / [Siderological](#) /
[Allosteric](#) / [Descriptive](#) / [Acetylcholinesterase](#) / [contents](#) /

Inhibitor: Tacrine

| Tacrine Type | Acetone |
|------------------------------|---|
| <u>Other name</u> | <u>Cogener</u> 3,4-dihydroquinazolin-2(1H)-one |
| <u>Chemical Nomenclature</u> | 3,4-dihydroquinazolin-2(1H)-one |
| <u>Formula</u> | C12H10N2O |
| <u>CAS number</u> | 301-64-2 |
| <u>MW</u> | 186.21 |



| | |
|--|---|
| <u>Kinetic parameter (k₀)</u> | |
| <u>Paper (k₀)</u> | |
| <u>Structure</u> | <u>TACR</u> |
| <u>Comment2</u> | <u>Tacrine</u> |
| <u>Comment</u> | C12H10N2O + HCl MW 204.71 CAS 1864-40-8 Treatment of Alzheimer Disease, Dementia & cognition Reversible inhibitor of both AChE and BChE |

For technical information about these pages see: [http://www.inra.fr/esther/](#)
 ESTHER: Home Page / [FAQ](#) / [Contact](#) / [Index](#) / [Table of contents](#) / [About Us](#) / [Tables](#) / [CONTACT](#) / [Database](#) / [Index](#) /
[Molecules](#) / [Kinetics](#) / [Descriptive](#) / [Siderological](#) / [Allosteric](#) / [Descriptive](#) / [Acetylcholinesterase](#) / [contents](#) /

Abbildung 1. Beispieleintrag in ESTHER

- [1] X. Cousin, T. Hotelier, K. Giles, J. P. Toutant, A. Chatonnet, *Nucl. Acid Res.* **1998**, 26, 226–228.
- [2] A. Chatonnet, T. Hotelier, X. Cousin, *Chem. Biol. Interact.* **1999**, 120, 567–576.
- [3] <http://www.accedb.org/>

Für weitere Informationen besuchen Sie:

<http://www.ensam.inra.fr/cholinesterase/>
oder nehmen Sie Kontakt auf mit:
chatonne@ensam.inra.fr