idw - Informationsdienst Wissenschaft
Nachrichten, Termine, Experten

Pressemitteilung

Fachinformationszentrum Chemie GmbH
Vanessa Vogt-Herrmann

01.11.2012
http://idw-online.de/de/news504712

Wettbewerbe / Auszeichnungen, Wissenschaftliche Tagungen
Chemie, Informationstechnik, Mathematik, Medizin
überregional

Vergabe der FIZ CHEMIE Berlin-Preise 2012 am 12.11. in Goslar

FIZ CHEMIE Berlin-Preise 2012 gehen an Dr. Anselm Horn, Erlangen und Dipl.-Chem. Florian Pfeiffer, Stuttgart / Beiträge zur Arzneimittelforschung gegen Alzheimer und zur Verbesserung von Simulationsmethoden werden ausgezeichnet / Die Preise werden am 12. November auf der 8th German Conference on Chemoinformatics (GCC 2012) in Goslar (Beginn 15.10 h) überreicht; die Preisträger stellen ihre Arbeiten vor.

Die FIZ CHEMIE Preise 2012 gehen an Dr. Anselm H. C. Horn und Florian Pfeiffer. Die beiden Wissenschaftler haben mit ihren Abschlussarbeiten jeweils hervorragende Ergebnisse zur Verbesserung von computergestützten Simulationen chemischer Vorgänge geliefert. Die Fachgruppe Chemie-Information-Computer (CIC) der Gesellschaft Deutscher Chemiker e.V. (GDCh) zeichnet sie für ihre Forschungserfolge mit dem FIZ CHEMIE Preis 2012 aus. Der Preis wird an Nachwuchswissenschaftler vergeben, die mit ihrer Dissertation, Master- oder Diplomarbeit eine besondere Leistung zur Weiterentwicklung des Fachgebietes erbringen.
Computerbasierte Forschungsmethoden und Simulationswerkzeuge sind aus der Chemieforschung nicht mehr wegzudenken. In allen Fachgebieten, die auf ihr aufbauen, werden sie heute ganz selbstverständlich als Ergänzung und Unterstützung zu den traditionellen Methoden im Labor eingesetzt. Die Simulationen dienen dazu, neue chemische Verbindungen zu entwerfen, sie (rechnerisch) unterschiedlichen Bedingungen auszusetzen, Reaktionen zu simulieren, neue Arzneimittel zu entwerfen und Wirkmechanismen zu verstehen bzw. vorherzusagen. Auf diese Weise kann zum Beispiel der Kreis von Ausgangsstoffen für experimentelle Untersuchungen auf vielversprechende Kandidaten eingegrenzt und so Zeit und Geld gespart werden. Bei Gefahrstoffen erhöhen Simulationen auch die Arbeitssicherheit.
Anselm Horn hat in seiner Doktorarbeit durch Simulationen wertvolle Erkenntnisse für die Entwicklung eines potentiellen Medikamentes zur Behandlung der Alzheimer-Krankheit gewonnen und einen konkreten Vorschlag zum Wirkmechanismus von Vorläufer-Arzneimitteln gegen Alzheimer unterbreitet. Im theoretischen Teil hat er eine Methode zur quantenchemischen Berechnung des elektrostatischen Potentials in Molekülen entwickelt und programmiert, sowie Simulationsparameter für modifizierte Eiweißbausteine entworfen. Die Ergebnisse stehen der Wissenschaft nun für vielfältige Forschungsarbeiten zur Verfügung, bei denen z.B. solche Eiweißstoffe eine Rolle bei der Signalweiterleitung in der Zelle spielen. Die Dissertation wurde in der Arbeitsgruppe von Professor Dr. rer. nat. Heinrich Sticht, Professor für Bioinformatik am Institut für Biochemie der Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg verfasst. Insgesamt 14 Publikationen und ein Patent sind bislang daraus hervorgegangen.
Florian Pfeiffer hat in seiner ausgezeichneten Diplomarbeit ein Computerprogramm erstellt, das eine konsistente Beschreibung von Schwingungszuständen in Molekülen möglich macht und es in ein übergeordnetes Programmpaket implementiert, das weltweit von Wissenschaftlerinnen und Wissenschaftlern in Industrie und Forschung verwendet wird. Die akkurate Berechnung molekularer Schwingungsspektren wird mit der Größe von Molekülen immer schwieriger, da Resonanzen zwischen Schwingungszuständen mit der zunehmenden Zustandsdichte wahrscheinlicher werden. Das Programm bringt bei Simulationen qualitativ dieselben Ergebnisse wie bisher verfügbare Programme, ist dabei aber um ein Vielfaches schneller. Der junge Chemoinformatiker hat seine Diplomarbeit in der Arbeitsgruppe von Professor Dr. Guntram Rauhut am Institut für Theoretische Chemie der Universität Stuttgart angefertigt.

Ausführlichere Informationen zur Arbeit von Dr. Anselm Horn

Die Doktorarbeit von Anselm Horn trägt den Titel: „Entwicklung computerchemischer Simulationsmethoden und Anwendung auf das Amyloid-β Peptid der Alzheimer-Krankheit“. Zu diesem Forschungsthema erklärt sein Doktorvater an der Universität Erlangen-Nürnberg, Prof. Heinrich Sticht: „Trotz großer Anstrengungen existiert bisher noch kein einziger Wirkstoff, der das Fortschreiten der Alzheimer-Krankheit aufhalten kann. Ein strukturelles Verständnis der Krankheit wird durch die große Variabilität der Konformation und des Aggregationszustandes des Amyloid-β Peptids erschwert“.
Die Arbeit von Anselm Horn hat hierzu wichtige Erkenntnisse gebracht. Im Methodenteil beschäftigte er sich zunächst mit verfügbaren Verfahren für die Berechnung des elektrostatischen Potentials in Molekülen. Diese Eigenschaft, die positiv bzw. negativ geladene Molekülbereiche beschreibt, spielt z.B. bei der Arzneistoffentwicklung eine große Rolle. Dazu entwickelte er eine neue quantenchemische Methode, die gegenüber bisherigen Algorithmen einen deutlichen Gewinn an Rechenzeit, Genauigkeit und Anwendungsbreite aufweist. Darüber hinaus entwickelte er für die Untersuchung phosphorylierter Eiweiße einen einheitlichen Satz geeigneter Simulationsparameter.
Im Anwendungsteil untersuchte er in Simulationen die Bewegungen derjenigen Eiweißstoffe im menschlichen Körper, von denen man annimmt, dass sie die Alzheimer-Krankheit verursachen. Amyloid-β-Eiweiße kommen normalerweise in einer gesunden Form im Körper vor, können sich aber unter bestimmten Umständen so verformen, dass sie aggregieren und lange Fäden bilden, die man dann im Hirn von Patienten findet. Den Weg, wie sie sich umformen und dann zusammenlagern, versteht man bis heute nicht.
Nach Moleküldynamiksimulationen verschiedener Amyloid-β-Aggregate suchte Anselm Horn mit Hilfe weiterer Simulationen nach chemischen Substanzen, die als Wirkstoffe für mögliche Alzheimer-Medikamente in Betracht kommen. Es gelang ihm, einen Vorschlag für den Wirkmechanismus einer Klasse dieser Medikamentenvorläufer zu machen.
Für Fachkollegen erklärt Professor Sticht: „Der herausragende Befund der Arbeit ist sicher das rationale Design von Hybridsubstanzen, die aus einem an Aminopyrazol-Trimer gebundenen D-Peptid bestehen. Experimentelle Studien haben gezeigt, dass diese Substanzen hocheffizient sowohl Fibrillen auflösen, als auch den Abbau neurotoxischer Aβ-Oligomere ermöglichen und darüber hinaus in der Lage sind, Aβ-bedingte neurologische Schäden zu verhindern“.
Seiner Ansicht nach hat Anselm Horn damit eindrucksvoll demonstriert, dass die Methoden der Chemoinformatik heute bereits einen signifikanten Beitrag zur Lösung komplexer medizinischer Fragestellungen beitragen können.
Aus der Dissertation gingen ein Patent und 14 Veröffentlichungen hervor, u.a. in renommierten Journalen wie Angewandte Chemie, JACS, ACS Chemical Neuroscience.

Ausführlichere Informationen zur Arbeit von Florian Pfeiffer
Nach nur neun Semestern Studienzeit hat Florian Pfeiffer seine am Institut für Theoretische Chemie der Universität Stuttgart angefertigte Diplomarbeit mit dem Titel „Beschleunigung selbstkonsistenter Multikonfigurationsmethoden zur Berechnung molekularer Schwingungszustände durch Einführung von Polynomen“ vorgelegt. Dabei hat sich der junge Wissenschaftler, so der Leiter der Arbeitsgruppe, Professor Dr. Guntram Rauhut, „nicht nur ausgesprochen erfolgreich mit der anspruchsvollen Theorie auseinandergesetzt, sondern auch immer die Anwendung der Theorie auf forschungsrelevante Systeme gesucht“.
Die Grundidee für seine Diplomarbeit hat der begabte Nachwuchswissenschaftler nach eigenen Worten „aus der Elektronenstrukturtheorie abgeschaut“. Der Ansatz ist schon seit 1971 bekannt, allerdings wurde er bislang nicht effizient in die Schwingungsstrukturtheorie übertragen. Die komplette Berechnung der Schwingungsspektren ist selbst für Moleküle mit einer Hand voll Atomen sehr aufwendig. Mehrere Arbeitskreise arbeiten an Lösungsansätzen. Florian Pfeiffer ist es nun gelungen, eine Methode zu entwickeln und zu programmieren, die eine konsistente und effiziente Beschreibung von Schwingungszuständen in Molekülen ermöglicht. Damit lassen sich Schwingungsspektren für Moleküle mit bis zu zehn Atomen sehr akkurat berechnen. Wichtig wird das zum Beispiel, wenn Resonanzen vorliegen, was bei großen Molekülen immer wahrscheinlicher wird, da mit steigender Atomanzahl die Zustandsdichte schnell zunimmt. Die mit dem Programm durchgeführten Simulationen bringen qualitativ dieselben Ergebnisse wie vergleichbare Programme, rechnen dabei aber um ein Vielfaches schneller. Experimentell arbeitende Wissenschaftler können damit die Schwingungsfrequenzen von neu synthetisierten Substanzen berechnen, um das von ihnen gemessene Schwingungsspektrum besser interpretieren zu können. Das Programm kann auch auf Verbindungen mit starken Resonanzen angewendet werden. Die Software ist in ein übergeordnetes Programmpaket eingebunden, das auf der ganzen Welt von Wissenschaftlern an Universitäten und in der Industrie verwendet wird.

Zum wissenschaftlichen Vorgehen erklärt Professor Rauhut: „Aufbauend auf der vor kurzem in das Programmpaket MOLPRO implementierten gitterbasierten Vibrational Multi-Configuration Self-Consistent Field Theory (VMCSCF) hat Herr Pfeiffer zur akkuraten Berechnung der Schwingungszustände einen polynombasierten VMCSCF-Ansatz entwickelt und für die Berechnung forschungsrelevanter Verbindungen eingesetzt. Dabei wird die Gitterdarstellung in eine Polynomdarstellung transformiert, wodurch die benötigten Integrale zur Berechnung der Schwingungszustände nur ein einziges Mal vor der Kontraktion in dem doppelt-iterativen Algorithmus berechnet werden müssen. Das bringt im Vergleich zur bisherigen gitterbasierten Implementierung eine starke Reduzierung des Rechenbedarfs."
Für Florian Pfeiffer war das Schwierigste an seiner Diplomarbeit nach eigener Aussage „quantenmechanisches Verständnis und eine Programmiersprache zu erlernen und dann das, was das Programm theoretisch berechnen soll, mit der Informatik zusammenzubringen; das heißt, herauszufinden, wie die physikalischen Gleichungen praktisch implementiert werden können". Es ist ihm hervorragend gelungen. Seine Diplomarbeit wurde mit der Note 1,0 bewertet.

Persönliche Daten und Fakten zu den Gewinnern:
Dr. Anselm H.C. Horn

Gewinner des FIZ CHEMIE Berlin-Dissertationspreises 2012
Titel der Doktorarbeit: „Entwicklung computerchemischer Simulationsmethoden und Anwendung auf das Amyloid-β Peptid der Alzheimer-Krankheit"
Doktorvater und Forschungspartner: Professor Dr. rer. nat. Heinrich Sticht, Professor für Bioinformatik am Institut für Biochemie der Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg
http://www.biochem.uni-erlangen.de/forschung/arbeitsgruppe.php?arbeitsgruppe=6
Prof. Thomas Schrader, Uni Duisburg-Essen, Prof. Carsten Korth, Uni Düsseldorf, Prof. Dieter Willbold, Forschungszentrum Jülich, PD Stephan Schwarzinger, Uni Bayreuth.

Anselm H. C. Horn wurde am 14. Juni 1970 in Nürnberg geboren. Nach dem Abitur am humanistischen Heinrich-Schliemann-Gymnasium in Fürth und anschließender Bundeswehrzeit begann er zunächst ein Medizinstudium. Sein Interesse gehörte zwar schon am Gymnasium der Chemie, seinem dritten Abiturfach, aber mit den Leistungskursfächern Latein und Griechisch glaubte er sich für das Fach Medizin besser gerüstet, zumal es im vorklinischen Teil viele naturwissenschaftliche Fächer in sich vereint. Den Ausschlag für den Wechsel von der Medizin in die Chemie nach einem Semester gab ein Professor, der die Medizinstudenten in Chemie unterrichtete und dabei den Anschein erweckte, als wolle er nicht sein ganzes Wissen mit ihnen teilen. Nun wollte Anselm Horn die Grundlagen der Chemie erst recht verstehen.
Sein Chemiediplom erwarb er 1997 in der Gruppe von Prof. Tim Clark am Computer Chemie Centrum (CCC), Erlangen, eine der ältesten Lehr- und Forschungsstätten für das Zusammenspiel von Chemie, Information und Computer an deutschen Universitäten. Der Titel seiner Diplomarbeit war „Neue semiempirische MO-Methoden: ein kombinierter QM/MM-Ansatz zur Geometrieoptimierung. Anschließend beschäftigte er sich als wissenschaftlicher Mitarbeiter von Professor Sticht zwei Jahre mit Forschungsarbeiten zur Moleküldynamik vornehmlich rund um das Prion-Protein, bevor er zwei Jahre Elternzeit nahm, um seine älteste Tochter zu betreuen. Wieder an der Universität, beschäftigte er sich von 2007 bis 2011 wiederum mit Moleküldynamik, unter anderem an Amyloid-β-Eiweißen. Mitten in der heißen Phase der Promotionsvorbereitung fiel die Elternzeit für seine zweite Tochter im Jahr 2011 deutlich kürzer aus. Am 25. November 2011 wurde er mit seiner jetzt ausgezeichneten Dissertation zum Dr. rer. nat. promoviert.
Aktuell beschäftigt sich Dr. Anselm H. C. Horn weiter mit der Erforschung und Entwicklung von Werkzeugen, die helfen, die Umwandlung von Eiweißen im Körper besser zu verstehen, um darauf aufbauend Medikamente zu entwickeln. Er betreut in Erlangen mehrere Abschlussarbeiten zu diesem Thema mit. Für seine berufliche Karriere strebt er eine Habilitation in der Medizinischen Fakultät an, womit sich für ihn „der Kreis zum Studienbeginn wieder schließt". Seine Freizeit widmet der Naturwissenschaftler bevorzugt seiner Familie. Er engagiert sich in Elternbeiräten von Kinderkrippe und Schule und arbeitet in der Kirchengemeinde mit.

Florian Pfeiffer

Gewinner des FIZ CHEMIE Berlin-Diplomarbeitspreises 2012
Titel der Diplomarbeit: „Beschleunigung selbstkonsistenter Multikonfigurationsmethoden zur Berechnung molekularer Schwingungszustände durch Einführung von Polynomen“
Betreuer: Professor Dr. Guntram Rauhut, Institut für Theoretische Chemie der Universität Stuttgart. Unterstützung durch Dr. rer. nat. Sandra Heislbetz, ehemalige Doktorandin von Prof. Rauhut und die Doktoranden Michael Neff (Rauhut) und Christoph Köppl (Prof. H.-J. Werner) http://www.theochem.uni-stuttgart.de/index.html

Florian Pfeiffer ist am 23. Januar 1987 in Nürtingen geboren und in Bempflingen, einem Dorf zwischen Stuttgart und Reutlingen, aufgewachsen. Seine Chemielehrerin auf dem Gymnasium in der Nachbargemeinde Neckartenzlingen hat sein großes Interesse und Talent für Chemie schon sehr früh entdeckt und gefördert, indem sie ihn u.a. motivierte, in der 12. und 13. Stufe als „Lehrkraft“ in einer Kinderakademie einmal in der Woche mit Fünftklässlern chemische Experimente durchzuführen. Im Oktober 2006 nahm Florian Pfeiffer an der Universität Stuttgart das Chemiestudium mit der Vertiefungsrichtung Theoretische Chemie auf, das er mit der ausgezeichneten Diplomarbeit 2011 abschloss. Seit mittlerweile anderthalb Jahren arbeitet der junge Wissenschaftler an seiner Dissertation. Er will ein Verfahren entwickeln, das die Berechnung von Spektren noch größerer Moleküle möglich macht. Florian Pfeiffer ist überzeugt, dass die Simulation von chemischen und physikalischen Eigenschaften für die chemische und pharmazeutische Forschung in Zukunft immer wichtiger wird.

Konferenzhomepage 8th German Conference on Chemoinformatics (GCC 2012)
https://www.gdch.de/index.php?id=1400

Weitere Informationen
FIZ CHEMIE
Postfach 12 03 37
D-10593 Berlin
www.chemistry.de
E-Mail: info@fiz-chemie.de

Für die Presse:
Annette Prahl
Tel.: +49 (0)30 / 399 77- 110
E-Mail: prahl@fiz-chemie.de

Über FIZ CHEMIE
FIZ CHEMIE ist eine von Bund und Ländern geförderte gemeinnützige Einrichtung mit der primären Aufgabe, der Wissenschaft, Lehre und Industrie qualitativ hochwertige Informationsdienstleistungen im Bereich der allgemeinen Chemie, chemischen Technik und angrenzender Gebiete zur Verfügung zu stellen. FIZ CHEMIE unterhält Beziehungen zu Forschungs- und Informationseinrichtungen im In- und Ausland und hat Marketingabkommen mit Partnerorganisationen weltweit. Das Fachinformationszentrum engagiert sich für die Weiterentwicklung und Verknüpfung der nationalen und internationalen chemischen Fachinformation. FIZ CHEMIE ist ein Institut der wissenschaftlichen Infrastruktur in der Leibniz-Gemeinschaft (WGL).

Dr. Anselm H.C. Horn
Foto: A. Horn

Florian Pfeiffer
Foto: F. Pfeiffer