

Pressemitteilung

Technische Universität Kaiserslautern

Melanie Löw

03.11.2021

<http://idw-online.de/de/news778629>

Forschungs- / Wissenstransfer, Forschungsprojekte
Chemie, Informationstechnik, Medizin
überregional



Medica 2021: Entwicklung von Medikamenten – Software berücksichtigt Bewegung von Atomen

Bei verschiedenen Erkrankungen helfen oftmals Medikamente. Damit diese ihre Wirkung entfalten können, benötigen Forscher zum Beispiel genaue Informationen über die Oberflächenmoleküle der Viren oder Bakterien. Oft wird bei der Medikamentenentwicklung die Bewegung der Atome dieser Moleküle vernachlässigt. Dies kann aber Folgen für die Wirksamkeit haben. Ein Forscherteam arbeitet an einer Software, die solche Bewegungen berücksichtigt. Hilfreich ist sie etwa für die Entwicklung von Arzneimitteln. Auf der Medizintechnikmesse Medica stellt das Team seine Arbeit vom 15. bis 18. November in Düsseldorf am Forschungsstand Rheinland-Pfalz (Halle 3, Stand E80) vor.

Bis ein Medikament auf den Markt kommt, vergehen viele Jahre Entwicklungsarbeit. Der Wirkstoff muss in der richtigen Konzentration an den richtigen Ort, um seine Wirkung zu entfalten. Dabei soll es zu wenigen Nebenwirkungen kommen. Eine wichtige Rolle bei solchen Stoffen spielt der chemische Aufbau. Oft handelt es sich um langkettige Eiweißmoleküle. „Es gibt eine sich immer wiederholende Grundstruktur, das sogenannte Backbone oder Rückgrat, welches aus Kohlenstoff- und Stickstoff-Atomen besteht“, erläutert der Informatiker Robin Maack, Doktorand in der Arbeitsgruppe „Computer Graphics and Human Computer Interaction“ von Professor Dr. Hans Hagen an der Technischen Universität Kaiserslautern (TUK). „Dabei muss man sich das so vorstellen, dass die Atome nicht starr sind, sondern sich bewegen. Dies kann gerade beim Rückgrat starke Formänderungen des Moleküls bedeuten.“

Für die Entwicklung von Molekülen können bestimmte Konstellationen Folgen haben. Bei vielen herkömmlichen Programmen, die Proteine darstellen und visualisieren, werden die Bewegungsprozesse der zugrundeliegenden Atome ignoriert. „Sie werden häufig als fixierte Kugeln im Raum betrachtet, obwohl sie einen gewissen Bewegungsraum besitzen“, erläutert Maack. „Dabei kann es durch die Bewegungen zu Wechselwirkungen zwischen den Atomen kommen.“

Maack arbeitet derzeit gemeinsam mit seiner Kollegin Dr. Christina Gillmann von der Universität Leipzig an einer Software, die diesen Bewegungsraum berechnet und ihn gemeinsam mit der ursprünglichen Visualisierung darstellt, ohne dass dabei vorhandene Informationen überdeckt werden. „Nutzer können mit der Software verschiedene Visualisierungsmethoden und Farbschema miteinander kombinieren“, so Maack weiter. „Sie ist übersichtlich gestaltet und ermöglicht es aber auch, dass Positionsunsicherheiten der Atome dargestellt werden.“

Ihren Algorithmus füttern die Informatiker dabei mit Daten von simulierten und realen Molekülen. Hierbei steht die Betrachtung der Atombewegungen im Vordergrund. „Das Programm zeigt nun genauer an, welche Stellen eines Moleküls stabil sind und welche nicht“, sagt Maack.

Interessant ist das Verfahren vor allem für die Entwicklung von Arzneimitteln und anderen Wirkstoffen. Die Technik erlaubt es, schnell zu sehen, ob es Sinn macht und überhaupt möglich ist, das Molekül zu entwickeln und zu produzieren.

Auf der Medica stellt das Team seine Arbeit vor.

Fragen beantworten:

Robin Maack
Computergrafik und Human Computer Interaction
TU Kaiserslautern
Tel: 0631 205-3268
E-Mail: maack@rhrk.uni-kl.de

Christina Gillmann
Abteilung für Bild- und Signalverarbeitung
Universität Leipzig
Tel: 0341 97 32281
E-Mail: gillmann@informatik.uni-leipzig.de

Der Auftritt der Forscherinnen und Forscher der TU Kaiserslautern auf der Messe wird von Klaus Dosch vom Referat für Technologie und Innovation organisiert. Er ist Ansprechpartner für Unternehmen und vermittelt unter anderem Kontakte zur Wissenschaft.

Kontakt: Klaus Dosch, E-Mail: [dosch\(at\)rhi.uni-kl.de](mailto:dosch(at)rhi.uni-kl.de), Tel. (auch während der Messe): 0631 205-3001

wissenschaftliche Ansprechpartner:

Robin Maack
Computergrafik und Human Computer Interaction
TU Kaiserslautern
Tel: 0631 205-3268
E-Mail: maack@rhrk.uni-kl.de

Christina Gillmann
Abteilung für Bild- und Signalverarbeitung
Universität Leipzig
Tel: 0341 97 32281
E-Mail: gillmann@informatik.uni-leipzig.de



Das Team arbeitet an der neuen Software (v.l.n.r.): Kurt Schardt, Robin Maack und Christina Gillmann.
Foto: View/Reiner Voss
TUK