



FIZ CHEMIE Berlin-Preise 2006 für hervorragende Arbeiten im Fachgebiet Chemie-Information-Computer gehen an Dr. Alexander Schug und Birte Seebeck

Nachwuchswissenschaftler werden für Forschungsarbeiten zur Vorhersage von Proteinstrukturen und Protein-Interaktionen ausgezeichnet

Berlin, Goslar, November 2006 - Der Physiker Dr. Alexander Schug und die Diplom-Biologin/Diplom-Bioinformatikerin Birte Seebeck werden mit dem FIZ CHEMIE Berlin-Preis 2006 ausgezeichnet. Mit diesem Preis würdigt die Fachgruppe Chemie-Information-Computer (CIC) der Gesellschaft Deutscher Chemiker (GDCh) hervorragende Dissertationen und Diplomarbeiten, die eine besondere Forschungsleistung für die Weiterentwicklung des Fachgebietes darstellen. Die Auszeichnungen werden am Sonntag, 12. November 2006 auf der 2. German Conference on Chemoinformatics (12. - 14.11.) in Goslar, Niedersachsen vom Geschäftsführer des FIZ CHEMIE Berlin, Professor Dr. René Deplanque, überreicht. Am Montag, 13. November, stellen die Nachwuchswissenschaftler ihre ausgezeichneten Arbeiten den Teilnehmerinnen und Teilnehmern des Fachkongresses in Vorträgen vor.

Beide Preisträger haben Methoden zur computergestützten Vorhersage von räumlichen Proteinstrukturen und -interaktionen entwickelt, ihre Erkenntnisse in Software übertragen und die Funktionsfähigkeit bewiesen. Computerprogramme, die im Voraus berechnen können, welche dreidimensionale Struktur ein Protein annimmt und wie es mit anderen Molekülen, die an das Protein andocken, interagiert, werden in der biologischen Grundlagenforschung sowie in der biomedizinischen und der pharmazeutischen Forschung und Entwicklung eingesetzt. Wirkstoffe zur Entwicklung neuer Medikamente werden am Computer erforscht und mit Softwareunterstützung theoretisch entworfen, bevor sie in den Labortest gehen. So kann man zum Beispiel mit dem Computer vorhersagen, ob ein Molekül mit einem krankheitsrelevanten Zielprotein interagiert und sich somit prinzipiell als Wirkstoff eignet. Die Fachsprache bezeichnet diese Verfahren als "Molecular Modelling" bzw. "Molecular Design".

Dr. Alexander Schug überzeugte die Jury mit einer stark interdisziplinär geprägten Doktorarbeit mit dem Thema "Free-Energy Simulations using Stochastic Optimization Methods for Protein Structure Prediction". Aufbauend auf einem atomar aufgelösten Modell für die freie Energie eines Proteins in seiner natürlichen Umgebung entwickelte und adaptierte er eine ganze Reihe von stochastischen Optimierungsverfahren und wandte diese auf die Proteinfaltung an. Unter anderem setzte Schug dafür das stochastische Tunnelverfahren, Parallel Tempering, Energy-Landscape-Paving und evolutionäre Algorithmen zur Lösung seiner Problemstellung ein. Dem jungen Physiker gelang es mit diesen Verfahren, mehrere Proteine am Computer reproduzierbar und in Übereinstimmung mit experimentellen Messungen zu falten. Betreut wurde Schug bei seiner Dissertation von Privatdozent Dr. Wolfgang Wenzel vom Institut für Nanotechnologie am Forschungszentrum Karlsruhe. Schugs Doktorvater freut sich, dass "mit der Arbeit ein wesentlicher Durchbruch in der rechnergestützten Proteinstrukturvorhersage gelang und Schug dabei unter anderem den Beleg für die experimentelle Gültigkeit der über 30 Jahren alten "thermodynamischen Hypothese" des amerikanischen Nobelpreisträgers Christian B. Anfinsen lieferte".

Die von Schug erarbeiteten Methoden lassen sich nicht nur zur Proteinstrukturvorhersage anwenden, sondern können auch zur Optimierung von Produktions- und Verbrauchsplanungen eingesetzt werden; etwa zur Senkung



des Materialverbrauches bei der Entwicklung von elektronischen Schaltplatinen oder in der Routenplanung von Fluggesellschaften zur Berechnung der Flugstrecken mit dem geringsten Treibstoffverbrauch.

Birte Seebeck gewann den FIZ CHEMIE Berlin-Diplomarbeitspreis mit einer Arbeit zur "Modellierung von Metallwechselwirkungsgeometrien für das Protein-Ligand Docking Problem", mit der sie drei Jahre nach ihrem Biologie-Diplom ein zweites Diplom in Bioinformatik erwarb. Metallionen kommen in vielen Proteinstrukturen als Kofaktoren vor. Diese sogenannten Metalloproteine spielen eine wichtige Rolle im menschlichen Organismus und sind mögliche Angriffspunkte für Medikamente, beispielsweise zur Therapie von Glaukom (grüner Star) oder Bluthochdruck.

Die junge Forscherin ging in ihrer Arbeit der Frage nach, wie man die Wechselwirkungen zwischen den Metallionen in den Proteinstrukturen so erfassen und darstellen kann, dass es möglich wird, Wirkstoff-Kandidaten virtuell am Computer zu testen. Die Lösung ist ihr gelungen: Aus der statistischen Analyse kristallographisch aufgelöster Protein-Ligand-Komplexe leitete Seebeck ein Modell zur Darstellung von Metallwechselwirkungen ab und entwickelte ein Verfahren für die automatische Zuordnung der geometrischen Wechselwirkungsparameter zu Metallen in Proteinstrukturen. Ihr Metall-Interaktionsmodell wurde in die Docking-Software "FlexX" der Firma BioSolveIT GmbH, Sankt Augustin, integriert. Mit Hilfe dieser Software können chemische Verbindungen, die als therapeutisch wirkende Substanz für ein Arzneimittel in Frage kommen, am Rechner auf ihre Tauglichkeit für den Einsatz getestet werden.

"Birte Seebeck hat sich mit der Auswahl ihres Themas einer sehr schwierigen interdisziplinären Aufgabe gewidmet, zu deren Lösung sowohl sehr gute Kenntnisse in der Chemie und Strukturbioologie als auch in Informatik erforderlich waren", so Professor Dr. Matthias Rarey vom Zentrum für Bioinformatik der Universität Hamburg, der die Diplomarbeit betreute. Bemerkenswert an der Arbeit der Bioinformatikerin sei besonders der Detailgrad der ihrer Methode zugrunde liegenden Modelle. "Beispielsweise erfolgte die Berücksichtigung monodentaler vs. bidentaler Bindung von Carboxylatgruppen, eine genaue Analyse von Mehrdeutigkeiten in den Winkellisten und eine anwendungsorientierte Implementierung des Modells, die eine manuelle Korrektur von Modellparametern wie zum Beispiel der Koordinierungsgeometrie ermöglicht", erklärt Rarey für Fachleute. Die Validierung ihres neuen Modells hat Seebeck nach Aussage ihres Professors mit großer Sorgfalt durchgeführt.

Persönliche Daten zu den Gewinnern:



Alexander Schug Gewinner des FIZ CHEMIE Berlin-Dissertationspreises 2006. Titel der prämierten Doktorarbeit: "Free-Energy Simulations using Stochastic Optimization Methods for Protein Structure Prediction". Der Physiker Dr. Alexander Schug wurde am 13.08.1976 in Berlin geboren und wuchs im Münsterland in Nordrhein-Westfalen auf. Er besuchte das St.-Josef-Gymnasium in Bocholt und studierte später in Dortmund Physik. Sein Schwerpunkt lag auf theoretischer Festkörperphysik. Als Nebenfächer hatte er Chemie und Informatik belegt. Im Rahmen seiner Diplomarbeit, die auch schon von Dr. Wolfgang Wenzel - damals noch an der Universität Dortmund - begleitet wurde, begann er, interdisziplinär zu forschen. Von 2002 bis 2005 arbeitet er am Forschungszentrum Karlsruhe an seiner jetzt prämierten Dissertation. Danach folgte ein halbjähriger Forschungsaufenthalt in Japan an der Kobe University im Rahmen eines CREST-Stipendiums. Von dort ging Schug Anfang 2006 an die

University of California in San Diego, wo er als Forscher am "Center for Theoretical Biological Physics" arbeitet.



FIZ CHEMIE BERLIN

Fachinformationszentrum Chemie GmbH



Birte Seebeck Gewinnerin des FIZ CHEMIE Berlin-Diplomarbeitspreises 2006. Titel der prämierten Diplomarbeit: "Modellierung von Metallwechselwirkungsgeometrien für das Protein-Ligand Docking Problem". Birte Seebeck wurde am 01.06.1976 in Bremen geboren und wuchs in Ritterhude-Stendorf in Niedersachsen auf. Sie besuchte das Gymnasium in Osterholz-Scharmbeck und studierte danach von 1995 bis 2002 Biologie mit den Schwerpunkten Molekularbiologie und Biochemie an der Universität Bremen. Während ihres Studiums verbrachte sie ein Jahr in Schottland, wo sie an der University of Glasgow Molecular and Cellular Biology vertiefend studierte. Nach Abschluss ihrer Biologie-Diplomarbeit, die sie am Zentrum für Humangenetik der Universität Bremen zum Thema "Molekulargenetische Untersuchungen zur Regulation des HMGA2-Gens" schrieb, arbeitete sie als wissenschaftliche Mitarbeiterin bei der alcedo biotech GmbH

in Bremen. Im Oktober 2003 nahm sie ihr zweites Studium der Bioinformatik am Zentrum für Bioinformatik der Universität Hamburg auf, das sie mit ihrer ausgezeichneten Diplomarbeit im Juni 2006 abschloss. Seebeck promoviert seit August 2006 als Wissenschaftliche Mitarbeiterin am Zentrum für Bioinformatik der Universität Hamburg.

Weitere Informationen

FIZ CHEMIE Berlin

Postfach 12 03 37

D-10593 Berlin

www.chemistry.de

E-Mail: info@fiz-chemie.de

Für die Presse

Richard Huber

Tel.: +49 (0)30 / 399 77- 217

E-Mail: huber@fiz-chemie.de

Über FIZ CHEMIE Berlin

FIZ CHEMIE Berlin 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. Es ist nach der Qualitätsnorm DIN EN ISO 9001:2000 zertifiziert. FIZ CHEMIE Berlin 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 Berlin ist ein Service-Institut in der Wissenschaftsgemeinschaft Gottfried Wilhelm Leibniz (WGL)

Alle Aussagen in dieser Pressemitteilung, die nicht historischen Charakters sind, beziehen sich auf die Zukunft im Sinne des U.S. Sicherheitsgesetzes. Die vorausschauenden Aussagen sind Annahmen, die auf dem gegenwärtigen Informationsstand basieren und somit gewissen Unsicherheitsfaktoren unterliegen. Tatsächlich eingetretene Ergebnisse können von den vorausgesagten Ergebnissen durch vielfältige Faktoren wesentlich abweichen, hervorgerufen z. B. durch Veränderungen bezüglich Technologie, Produktentwicklung oder Produktion, Marktakzeptanz, Kosten oder Preise der Produkte von FIZ CHEMIE Berlin und Abhängigkeiten von Kooperationen und Partnern, Genehmigungsverfahren, Wettbewerb, geistigen Eigentums oder Patentschutz- und Copyrightrechten.