

PRESSEMITTEILUNG zur Vergabe der FIZ CHEMIE Berlin-Preise 2008 am 10. 11. in Goslar

FIZ CHEMIE Berlin-Preise 2008 gehen an **Dr. Oliver Korb** für einen neuen Ameisenalgorithmus zum Struktur- und Ligand-basierten Arzneimittelentwurf, den er mit Hilfe von Grafikkarten beschleunigt, und an **Andreas Jahn**, der die Flexibilität molekularer Strukturen in Chemiesoftware integriert hat, so dass die relative räumliche Anordnung der Atome bei der Suche nach Strukturen und für Berechnungen beispielsweise der voraussichtlichen biologischen Wirkung berücksichtigt werden kann

## **Junge Wissenschaftler erhalten für innovative Beiträge zur Arzneimittelforschung den FIZ CHEMIE Berlin Preis 2008**

*Berlin, 31. Oktober 2008* – Computer und Datenbanken helfen der pharmazeutischen Forschung dabei, schneller neue Arzneimittel zu entwickeln. Aus dem interdisziplinären Zusammenwirken von Chemie und Informatik, das für die komplexen Chemiesoftware-Systeme notwendig ist, hat sich eine eigene Forschungsrichtung herausgebildet: die Chemoinformatik. Besondere Forschungsleistungen zur Weiterentwicklung der Chemoinformatik zeichnet die Fachgruppe Chemie-Information-Computer (CIC) der Gesellschaft Deutscher Chemiker (GDCh) einmal jährlich mit dem FIZ CHEMIE Berlin Preis für je eine hervorragende Doktor- und Diplomarbeit aus.

Die FIZ CHEMIE Berlin Preise des Jahres 2008 gehen an Dr. Oliver Korb für seine Dissertation bei Professor Dr. Thomas Exner an der Universität Konstanz und Andreas Jahn für seine Diplomarbeit bei Professor Dr. Andreas Zell an der Universität Tübingen. Beide Forschungsarbeiten liefern wesentliche Beiträge zur Verbesserung der computergestützten Arzneimittelforschung.

Oliver Korb hat in seiner ausgezeichneten Doktorarbeit einen neuen Ameisenalgorithmus zum Struktur- und Ligand-basierten Arzneimittelentwurf am Computer entwickelt, den er für schnellere Berechnungen mit Hilfe von Grafikkarten beschleunigt. Die Dissertation trägt den Titel: "Efficient Ant Colony Optimization Algorithms for Structure- and Ligand-Based Drug Design".

Andreas Jahn hat in seiner mit sehr gut bewerteten Diplomarbeit die Flexibilität der räumlichen Anordnung von Atomen in einem Molekül in Chemiesoftware integriert, so dass die Flexibilität der Moleküle bei der Suche nach Strukturen und für Berechnungen beispielsweise der voraussichtlichen biologischen Wirkung berücksichtigt werden kann. Der Titel der Arbeit lautet: "Incorporating Molecular Flexibility into three-dimensional Structural Kernels".

Die FIZ CHEMIE Berlin Preise werden am Montag, den 10. November 2008 auf der 4. German Conference on Chemoinformatics (9. bis 11. November) in Goslar, Niedersachsen vom Geschäftsführer des FIZ CHEMIE Berlin, Professor Dr. René Deplanque, überreicht. Neben den Geldpreisen von 500,- Euro für die Dissertation und 250,- Euro für die Diplomarbeit sowie Anerkennungsurkunden haben die jungen Wissenschaftler dort die Gelegenheit, ihre ausgezeichneten Arbeiten den fachkundigen Teilnehmerinnen und Teilnehmern der Konferenz in Vorträgen vorzustellen.

Text und Fotos finden Sie auch im Informationsdienst Wissenschaft - idw - unter: <http://www.idw-online.de/pages/de/news286688>

Hintergrundinformationen:

Zum Fachgebiet Chemoinformatik:

Wissenschaftler können heute dank Chemoinformatik in großen Chemiedatenbanken mit Formeln, Strukturen, Fachbegriffen und Stichworten gezielt nach Substanzen, z.B. Wirkstoffen mit bestimmten Eigenschaften zum Ausschalten eines krankheitsverursachenden Proteins, suchen. Umgekehrt können durch Synthese neu gewonnene Substanzen, auch Teilstrukturen und -sequenzen, gegen Datenbankbestände abgeglichen werden. Leistungsstarke Programme berechnen und simulieren, wie sich die verschiedenen zur Lösung der Aufgabe in Frage kommenden Wirkstoffe voraussichtlich beim Andocken an das Zielprotein sowie in der für das Medikament notwendigen chemischen Verbindung und beim Transport durch den Körper verhalten werden. Die bequeme Suche, das schnelle Auffinden und die am Computer durchgeführten Vorausberechnungen ersparen eine Menge Laborarbeit. Mit Hilfe der Softwaresysteme kann beispielsweise in relativ kurzer Zeit aus -zig Millionen Daten eine qualitativ sehr hochwertige Wirkstoff-Vorauswahl getroffen werden. Diese Vorauswahl wird von den Forschern dann nach Kriterien wie Verträglichkeit, Stabilität, besseren Eigenschaften bei der Synthese und

Arzneimittelproduktion, Haltbarkeit usw. weiter selektiert. Die Wirkstoffkombinationen mit den besten Eigenschaften werden dann im Labor experimentell getestet und bei Eignung zu Medikamenten weiterentwickelt.

Der Fachbegriff für die Wirkstoffsuche mit Hilfe von Computern und Chemiesoftwaresystemen lautet "**Virtual Screening**". Der Entwurf neuer Verbindungen wird als "**Molecular Modelling**" bezeichnet. Beim Entwurf neuer Medikamente spricht man von "**Drug Design**". Hierbei werden Arzneimittel komplett am Computer entworfen und dann im Labor experimentell nachgebaut und getestet.

Zur Dissertation von Dr. Oliver Korb:

Zur Arbeit von Oliver Korb erklärt sein Doktorvater Professor Dr. Thomas E. Exner: "Der Erfolg der neuen Verfahren für das Protein-Ligand-Docking und die Ligand-Überlagerung beruht maßgeblich auf der von Herrn Korb durchgeführten Kombination des globalen Ant Colony Optimization (ACO)-Verfahrens mit dem kontinuierlichen Nelder-Mead-Simplex-Verfahren. ACO ahmt die Fähigkeit von Ameisenkolonien nach, kürzeste Wege zu Futterquellen zu finden, um niederenergetische Strukturen von Protein-Ligand-Komplexen bzw. die beste Überlagerung von mehreren aktiven Liganden vorherzusagen. Für das Protein-Ligand-Docking ist das Verfahren so in der Lage, eine Vielzahl von Komplexstrukturen sehr genau und effizient vorherzusagen. Dies gelingt aber nur mit den von Herrn Korb im Rahmen seiner Dissertation entwickelten Zielfunktionen. In vielen anderen Verfahren stellen gerade die entsprechenden Zielfunktionen den limitierenden Faktor dar. Der neue Ansatz von Herrn Korb kann auch für das Virtuelle Screening in der Arzneimittelforschung eingesetzt werden. Die Portierung des Ansatzes auf moderne Grafikkarten mit hoher Rechenleistung bringt eine weitere Steigerung der Effizienz."

Oliver Korb bezeichnet als größte Herausforderung seiner Doktorarbeit die Notwendigkeit, sowohl ein effizientes Optimierungsverfahren, als auch gleichzeitig die Zielfunktionen zur Vorhersage chemisch sinnvoller Komplexstrukturen bzw. Ligand-Überlagerungen zu entwickeln. Während er für das Optimierungsverfahren Ansätze aus der Informatik verwenden konnte, war für die Zielfunktionen eine tiefe Einarbeitung in Themengebiete der theoretischen Chemie und Biochemie notwendig.

Die von Korb entwickelten Algorithmen wurden mit dem neuen Docking-Programm PLANTS anderen Arbeitsgruppen in Deutschland, Frankreich, England und Italien zur Verfügung gestellt. Auch in der pharmazeutischen Industrie fand das Verfahren bereits eine erste Anwendung. So konnten bereits viel versprechende Ergebnisse im rationalen Wirkstoffdesign erzielt und teilweise schon experimentell bestätigt werden.

Zur Diplomarbeit von Andreas Jahn:

Professor Dr. Andreas Zell erklärt zur Diplomarbeit von Andreas Jahn: "Die Erweiterung des Optimal Assignment Kernel (OAK) um konformationelle Flexibilität, die Herr Jahn realisiert hat, ermöglicht es, die dreidimensionale Struktur von Molekülen in die Wirkstoffsuche und Vorausberechnungen einzubeziehen, ohne auf ein Konformationssampling angewiesen zu sein. Es ist ihm nicht nur sehr schnell gelungen, die Aufgabenstellung, lokale Flexibilität in atomaren Ähnlichkeitsmaßen zu kodieren und starre Strukturelemente in fragmentierte 3D-Überlagerung zu bringen, sondern auch, Schwachstellen durch eigene Ideen zu verbessern und die Ansätze zu erweitern. Die Implementierung der von ihm entwickelten Algorithmen ist qualitativ hervorragend. Sie konnten ohne weiteren Aufwand in die an unserem Lehrstuhl entwickelten Softwarepakete übernommen werden".

Für Andreas Jahn selbst war die größte Herausforderung an seiner Diplomarbeit nach eigener Aussage "der Spagat zwischen einerseits effizienten und performanten Modellen und deren Programmierung, da die Ähnlichkeitsmaße sehr schnell arbeiten müssen, und andererseits der gleichwertigen Anforderung, die Chemie der Strukturen möglichst realistisch in die Berechnung einfließen zu lassen". Dieser Spagat ist ihm mit seiner ausgezeichneten Arbeit gelungen.

Persönliche Daten und Fakten zu den Gewinnern:

Dr. Oliver Korb

Gewinner des FIZ CHEMIE Berlin Dissertationspreis 2008

Doktorvater: Professor Dr. Thomas E. Exner, Universität Konstanz, Fachbereich Chemie.

Titel der prämierten Doktorarbeit: "Efficient Ant Colony Optimization Algorithms for Structure- and Ligand-Based Drug Design".

Oliver Korb wurde 1979 in Hanau, Hessen geboren. 1998 legte er sein Abitur am Franziskanergymnasium Kreuzburg in Großkrotzenburg, Hessen ab. Seine Leistungskurse waren Mathematik und Physik. Schon vor Beginn seines Informatik-Studiums an der Technischen Universität in Darmstadt schnupperte er als Werkstudent bei *Hoechst Marion Roussel* in Frankfurt in die Pharmaindustrie hinein und beschäftigte sich mit Verfahren zur Optimierung der Zusammenstellung von Einsatzstoffen für einen Pharmasynthesebetrieb. Die Arbeit des jungen Werkstudenten mündete in einem Verbesserungsvorschlag, der mit einer Geldprämie belohnt wurde. An der TU Darmstadt studierte Korb Informatik mit Nebenfach Chemie und beschäftigte sich besonders mit den Themengebieten kombinatorische Optimierung, graphische Datenverarbeitung und Robotik. Während des Studiums entwickelte er als Werkstudent Datenbanksysteme bei *Aventis Pharma Deutschland GmbH* sowie als freier Mitarbeiter bei der *Provadis Partner für Bildung und Beratung GmbH* mit. In seiner interdisziplinären Diplomarbeit beschäftigte er sich mit Heuristiken zur approximativen Lösung des globalen rigiden Protein-Ligand-Docking-Problems. Sie wurde mit sehr gut bewertet und mit dem Alarich Weiss-Preis 2005 ausgezeichnet.

Im Oktober 2004 trat Korb der Arbeitsgruppe Theoretische Chemische Dynamik von Professor Dr. Thomas E. Exner an der Universität Konstanz bei. Hier entwickelte er im Rahmen seiner Dissertation naturinspirierte Docking-Verfahren. Für die Entwicklung einer Grafikkarten-beschleunigten Version des auf Ameisenalgorithmen basierenden Docking-Verfahrens gewährte ihm die Landesgraduiertenförderung Baden-Württemberg ab 2005 ein zweijähriges Promotionsstipendium. Diese Zeit nutzte er für seine jetzt mit dem FIZ CHEMIE Berlin Preis 2008 ausgezeichnete Dissertation. Seit Oktober 2008 setzt Dr. Oliver Korb seine wissenschaftliche Arbeit am Cambridge Crystallographic Data Centre in Cambridge, Großbritannien, fort.

Andreas Jahn

Gewinner des FIZ CHEMIE Berlin Diplomarbeitspreises 2008

Diplom abgelegt bei: Prof. Dr. Andreas Zell, Universität Tübingen, Wilhelm-Schickard-Institut für Informatik (WSI) / Zentrum für Bioinformatik Tübingen (ZBIT)

Betreuer: Dipl.-Inform. Nikolas Fechner

Titel der prämierten Diplomarbeit: "Incorporating Molecular Flexibility into three-dimensional Structural Kernels"

Andreas Jahn kam im Mai 1982 in Oberndorf am Neckar zur Welt. Dort besuchte er die Grundschule auf dem Lindenhof und später das Gymnasium am Rosenberg. Von Oktober 2002 bis März 2008 studierte er an der Eberhard Karls Universität Tübingen am Lehrstuhl von Professor Dr. Andreas Zell Bioinformatik mit einer Vertiefung in Neurobiologie. Sein Interesse an der Chemoinformatik wurde durch seine Studienarbeit geweckt, die er am Lehrstuhl für Rechnerarchitektur von Professor Zell unter der Betreuung von Dr. Holger Fröhlich erarbeitete. Darin beschäftigte er sich mit der Deduktion von Pharmakophoren aus ADME-Datensätzen, also der Ableitung von pharmakologisch wirksamen Teilen von Molekülen aus Datensätzen, die alle Prozesse beschreiben, denen ein Arzneistoff im Körper unterliegt. Eine Aufgabe, die nur mit tiefem interdisziplinärem Wissen in Informatik und Biochemie gelöst werden kann. Neben Bioinformatik und Neurobiologie widmete Andreas Jahn der praktischen Informatik einen weiteren Schwerpunkt seines Studiums. Mit der Note 1,0 schloss er sein Studium mit der jetzt preisgekrönten Diplomarbeit als Diplom-Informatiker ab.

Andreas Jahn forscht weiterhin am Wilhelm-Schickard Institut für Informatik (WSI) und Zentrum für Bioinformatik Tübingen (ZBIT) bei Professor Zell. Mit der Suche nach besseren Möglichkeiten zur Kodierung der molekularen Flexibilität und der Bereitstellung besserer Ähnlichkeitsmaße für Moleküle setzt er seine mit der preisgekrönten Diplomarbeit begonnenen Untersuchungen zur Weiterentwicklung der pharmazeutischen Forschung fort.

Weitere Informationen

FIZ CHEMIE Berlin

Postfach 12 03 37

D-10593 Berlin

[www.chemistry.de](http://www.chemistry.de)

E-Mail: [info@fiz-chemie.de](mailto:info@fiz-chemie.de)

#### Ansprechpartner

Prof. Dr. René Deplanque  
Geschäftsführer  
Tel.: +49 (0)30 / 399 77- 200  
Fax: +49 (0)30 / 399 77- 133  
E-Mail: deplanque@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.