

Zeitschrift: Horizonte : Schweizer Forschungsmagazin
Band: 21 (2009)
Heft: 81

Artikel: Frische Moleküle
Autor: Gordon, Elisabeth
DOI: <https://doi.org/10.5169/seals-968351>

Nutzungsbedingungen

Die ETH-Bibliothek ist die Anbieterin der digitalisierten Zeitschriften. Sie besitzt keine Urheberrechte an den Zeitschriften und ist nicht verantwortlich für deren Inhalte. Die Rechte liegen in der Regel bei den Herausgebern beziehungsweise den externen Rechteinhabern. [Siehe Rechtliche Hinweise.](#)

Conditions d'utilisation

L'ETH Library est le fournisseur des revues numérisées. Elle ne détient aucun droit d'auteur sur les revues et n'est pas responsable de leur contenu. En règle générale, les droits sont détenus par les éditeurs ou les détenteurs de droits externes. [Voir Informations légales.](#)

Terms of use

The ETH Library is the provider of the digitised journals. It does not own any copyrights to the journals and is not responsible for their content. The rights usually lie with the publishers or the external rights holders. [See Legal notice.](#)

Download PDF: 18.10.2024

ETH-Bibliothek Zürich, E-Periodica, <https://www.e-periodica.ch>

Frische Moleküle

Ein Team von Chemikern der Universität Bern hat eine Datenbank mit rund 960 Millionen Molekülen geschaffen. Das Ziel ist es, neue Wirkstoffe zu finden, die eines Tages im Arzneimittelbuch einen Platz bekommen.

VON ELISABETH GORDON

Neue Medikamente im Kampf gegen noch unheilbare Krankheiten oder zur Verbesserung bestehender Behandlungen zu entdecken, ist das Ziel der pharmazeutischen Industrie – und auch von Jean-Louis Reymond vom Departement für Chemie und Biochemie der Universität Bern. Seine Arbeit beginnt allerdings ganz am Anfang des langen Weges hin zu neuen Medikamenten.

Auf der Suche nach neuen Wirkstoffen ging man lange von natürlichen Mitteln mit bekannter Wirkung aus: Man analysierte die Mittel, um den verantwortlichen Wirkstoff zu bestimmen, und versuchte, diesen im Labor zu synthetisieren. Jean-Louis Reymond und sein Team beschreiten den umgekehrten Weg. Sie beginnen bei den Molekülen, den «chemischen Bausteinen», auf denen Medikamente beruhen, und versuchen, darunter jene zu finden, die eine interessante pharmakologische Wirkung aufweisen könnten.

«Wir wollten eine abschliessende Liste aller möglichen Moleküle erstellen», erklärt der Chemieprofessor. Mit sehr leistungsfähigen Computern machten sich die Forschenden daran, wie mit Lego-Bausteinen alle denkbaren Gerüste organischer Moleküle aus den wichtigsten Atomen (Kohlenstoff, Stickstoff, Sauerstoff und Fluor) virtuell zusammenzubauen. Einzige Einschränkung waren die Gesetze der Chemie und der Pharmakologie. Vor zwei Jahren hatten sie eine Datenbank mit mehr als 26 Millionen kleinen Molekülen mit höchstens 11 Atomen erstellt. Dann wandten sie sich den Molekülen mit bis zu 13 Atomen zu und erhielten rund 960 Millionen! «Das ist die obere Grenze, die sich mit den heutigen Rechnerleistungen erreichen lässt», hält Jean-Louis Reymond fest. So oder so ist das Ergebnis beeindruckend. Und die Datenbank, die akademischen Laboratorien nun bereits zur Verfügung steht, hat auch das Interesse von pharmazeutischen Unternehmen geweckt.

Virtuelles Sieben

Die Berner Forschenden bleiben jedoch nicht auf halbem Weg stehen. Sie haben damit begonnen, ihre Sammlung zu erkunden und jene Moleküle virtuell «herauszusieben», die von pharmakologischem Interesse sind. Konkret geht es darum, mit Hilfe von Computerprogrammen die chemischen Strukturen

der Datenbank mit den Molekülen des Lebens, den Proteinen, zusammenzubringen und zu prüfen, ob sie aneinander binden und interagieren können. «Von allen Molekülen unserer Datenbank sind 20 bis 30 Prozent potenziell interessant», betont Prof. Reymond. Diese sollen im Labor hergestellt werden.

Wozu könnten sie dienen? In erster Linie für die Behandlung von Beschwerden des Nervensystems, die im Allgemeinen eher auf kleinen Molekülen beruht. Um auf Neurotransmitter wirkende Verbindungen wie Glutamat oder Acetylcholin aufzuspüren, die eine wichtige Rolle bei neurologischen Erkrankungen spielen, arbeiten die Chemiker eng mit Medizinerinnen in Bern und Genf zusammen. Es gibt zum Beispiel bereits therapeutisch eingesetzte Wirkstoffe, die den Acetylcholinrezeptor blockieren. «Davon liessen wir uns inspirieren: Wir suchten in unserer Datenbank nach analogen Verbindungen, die sich viel einfacher synthetisieren lassen – und haben bereits 70000 Kandidaten gefunden», erklärt der Forscher.

Der Weg von den virtuellen Verbindungen bis zu den zugelassenen Medikamenten ist noch lang und steinig. Mit ihrer sehr grundlegenden Arbeit wollten die Forschenden aber vor allem einen völlig neuen Weg für die Suche nach innovativen Stoffen aufzeigen. «Und unser Ansatz funktioniert», freut sich der Wissenschaftler.

Neuschöpfung im Modell: Eines der Moleküle, die Jean-Louis Reymond (im Spiegelbild) am Computer kreiert hat.

Severin Nowacki

