

Mittwoch, 12.01.2005

Wirkstoffentwicklung heute: Computer-basierte Techniken in der modernen pharmazeutischen Forschung

Prof. Dr. Matthias Rarey, Zentrum für Bioinformatik, Universität Hamburg

In den letzten 10 Jahren hat sich der Computer als fester Bestandteil der pharmazeutischen Forschung etabliert. Dabei wird der Computer nicht nur zur Speicherung, Verwaltung und Visualisierung wissenschaftlicher Daten, sondern zunehmend zur Vorhersage von physiko-chemischen Eigenschaften von Molekülen eingesetzt. Insbesondere während der Suche nach neuen Leitstrukturen in der pharmazeutischen Forschung werden Computerverfahren intensiv zur Vorhersage von Bioaktivität genutzt. Der Vortrag skizziert einige der verwendeten computerbasierten Techniken im Wirkstoffentwurf - von der Beschreibung molekularer Ähnlichkeit bis zum molekularen Docking- sowie eine Reihe von praktischen Anwendungen und Beispielen.



Prof. Dr. M. Rarey

Weiterführende Information: www.zbh.uni-hamburg.de