

Chemie für alle

Kommunikation der Moleküle

Mittwoch, 30. April 2014, Hörsaal B, Fachbereich Chemie, Martin-Luther-King-Platz 6, 17:00 Uhr

Computergestütztes Modelling: Molekülkomplexe - Nicht Live, aber in Farbe

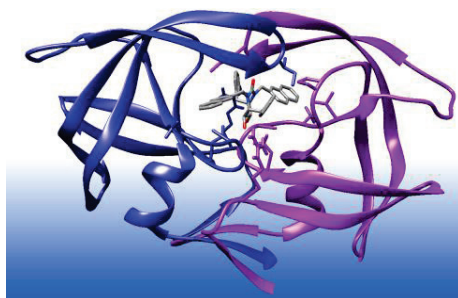
Professor Dr. Matthias Rarey
Universität Hamburg, Zentrum für Bioinformatik
E-Mail: Rarey@zbh.uni-hamburg.de

Kommunikation auf molekularer Ebene findet durch die Bildung von Molekülkomplexen statt. Die Bildung solcher energetisch günstigen Komplexe setzt eine Komplementarität der Molekülformen und -eigenschaften voraus. Molekülkomplexe bilden die Grundlage nahezu aller Prozesse in lebenden Organismen und auch unsere Medikamente basieren letztendlich auf der Fähigkeit kleiner Moleküle, mit den Biomolekülen unseres Organismus zu interagieren und ihn so funktionell zu beeinflussen.



Aufgrund der enormen wissenschaftlichen Entwicklung der Strukturbiologie in den vergangenen zwanzig Jahren haben wir heute die Möglichkeit, Molekülkomplexe bis auf die atomare Ebene in ihren © M. Rarey Strukturen zu analysieren. Diese Strukturinformationen sind ein zentraler Baustein für unser Verständnis von funktionellen Abläufen in Organismen. Die so erzielten Modelle dienen als Grundlage für moderne Methoden zur Suche nach neuen Medikamenten.

Computer spielen dabei als Werkzeug für die Visualisierung und den Entwurf neuer Moleküle eine wichtige Rolle. Anhand von Beispielen wird in diesem Vortrag das Gebiet des computergestützten Wirkstoffentwurfs einführend beschrieben.



Komplex zwischen HIV-Protease, einem wichtigen Zielprotein bei der Behandlung von HIV-Infektionen (blau und violett) und einem Wirkstoffmolekül (grau). © M. Rarey

Homepage: www.zbh.uni-hamburg.de/rarey