

Computerunterstützte Leitstruktursuche zur Identifizierung neuer Antiinfektiva

Dr. Thomas Lemcke

Universität Hamburg, Fachbereich Chemie, Institut für Pharmazie

E-Mail: thomas.lemcke@chemie.uni-hamburg.de

Die Entwicklung neuer Arzneimittel ist ein stark interdisziplinärer und auch langwieriger Prozess. Zu den klassischen Aufgaben der Medizinischen Chemie gehören dabei die Suche nach Substanzen, die das Potential haben, zu neuen Arzneimitteln weiterentwickelt werden zu können (Leitstrukturen). Bei diesem Prozess werden häufig computerunterstützte Methoden eingesetzt, die einerseits zeit- und ressourcensparend sind und andererseits die Aussichten auf Erfolg verbessern können.



In dem Vortrag werden kurz allgemeine Techniken bei der Leitstruktursuche erläutert und dann an einem Beispiel aus dem eigenen Arbeitsgebiet, der Vorgehensweise bei der Leitstruktursuche nach neuen Hemmstoffen der bakteriellen Gyrase durch virtuelles Screening, beschrieben.

