



Implementierung eines Ähnlichkeitsmaßes für das virtuelle Screening

Das virtuelle Screening ist ein wichtiger Schritt in der Entwicklung von Wirkstoffen gegen spezifische Proteinziele. Im virtuellen Screening wird mit einer *Query*-Struktur eine Datenbank von Molekülen durchsucht um Moleküle mit ähnlichen Eigenschaften, z.B. Aktivität gegen ein spezifisches Proteinziel, zu finden. Für das Durchsuchen werden Methoden zur Ähnlichkeitsberechnung zwischen Molekülen benötigt. Dabei sollte es diesen Methoden möglich sein, auch Moleküle mit einem unterschiedlichem Grundaufbau zu finden um z.B. eventuelle Patentierungsschwierigkeiten zu vermeiden.

Eine Möglichkeit dies zu erreichen, ist das Abstrahieren von der genauen Struktur hin zu einem Modell des Moleküls bezüglich bestimmter Eigenschaften wie z.B. Ladung. Mittels Messungen von diesen Eigenschaften an *Grid*-Punkten und dem Training von *Gaussian-Mixture* Modellen soll eine Abstraktion bezüglich dieser Eigenschaften erreicht werden. Zum Arbeiten mit Molekülen steht für Java das Chemistry Development Kit (CDK) zur Verfügung. Ziel dieser Arbeit ist die Implementierung und das Testen des oben beschriebenen Ähnlichkeitsmaßes.

Voraussetzung: Programmiererfahrung in Java.

Kontakt

Lars Rosenbaum
Sand 1, Raum A317
Tel. (07071) 29-77174
lars.rosenbaum@uni-tuebingen.de

