

Proteochemometric Modelling using Molecular Descriptors and Z-Scales

Ein an Bedeutung gewinnender Aspekt in der Arzneistoffentwicklung ist die Berücksichtigung der Targetspezifität (Selektivität) in frühen Phasen der Wirkstoffforschung. Insbesondere bei bedeutenden Targetfamilien wie Kinasen stellen Nebenwirkungen durch die Inhibition eines anderen Proteins zunehmend ein Problem dar.

Ein Ansatz, um dies zu umgehen, stellt die Proteochemometrik dar. Hierbei wird ausgehend von gemessenen Aktivitäten einer Menge von Liganden zu verschiedenen Rezeptoren ein Modell erstellt, das die Affinität eines Ligand-Rezeptor-Paares modelliert.

Im Rahmen dieser Arbeit soll die Eignung verschiedener molekularer Deskriptoren (JOELib, CDK) zur Ligandenkodierung und von *z-scales* zur Proteinrepräsentation implementiert werden. Auf Basis dieser numerischen Darstellungen sollen QSAR Modelle inferiert werden (Weka, LibSVM), die in der Lage sind, die Selektivität der Liganden zu beschreiben.

Voraussetzungen:

Erfahrung im Programmieren mit Java, sowie Kenntnisse aus den Bereichen des maschinellen Lernens und der Chemoinformatik.

Kontakt

Nikolas Fechner
Sand 1, Raum 317
Tel. (07071) 29-77174
nikolas.fechner@uni-tuebingen.de

