

Modelling of Protein Binding Sites for Combinatorial Ligand Design

Ziel dieser Arbeit ist die Untersuchung, auf welche Weise Expertenwissen über den Bindungsmodus zwischen Rezeptor und Ligand in einen automatisierten kombinatorischen Designprozess integriert werden kann.

Als Basis dient ein im Augenblick am Lehrstuhl entwickeltes Framework zur kombinatorischen *in silico* Synthese polypeptidischer Liganden. Diese Synthese ist in einen evolutionären Algorithmus eingebettet, der sicherstellen soll, dass nur möglichst erfolgsversprechende Kandidatenstrukturen vorgeschlagen werden. Entscheidend hierfür ist das Bewertungskriterium, das optimiert wird, und in das möglichst viel Vorwissen integriert werden soll.

Hierzu sollen Bindungsinformationen aus der Literatur zur Bewertung neuer Kandidatenstrukturen quantitativ formuliert werden. Zusätzlich sollen diese Information in den Docking Prozess mit dem Programm *Glide*TM übernommen werden um Bindungsmodus und Affinität der neuen Liganden möglichst gut nachbilden zu können

Voraussetzungen:

Sehr gute (Bio)chemiekenntnisse und Programmierkenntnisse in Java werden vorausgesetzt. Im Rahmen der Arbeit kann Erfahrung in der Verwendung der Schrödinger Molecular Modelling Software suite erworben werden

Kontakt

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

