

Neue Wege im Kampf gegen Viren

Expertensystem vereinfacht die Suche nach antiviralen Medikamenten

Emden (10. Mai 2006) - Das Biotech-Unternehmen PharmaInformatic hat heute ein neues Software-Produkt veröffentlicht, welches die gezielte Entwicklung neuer Medikamente gegen Viren ermöglicht.

Das Expertensystem MolScore-Antivirals kann aus Millionen von möglichen Substanzen die sinnvollsten Wirkstoffe im Kampf gegen Viren herausfiltern, welche dann gezielt zu antiviralen Medikamenten weiterentwickelt werden können. Durch die Technologie wird der Zeitaufwand aber auch die Entwicklungskosten bei der Suche nach neuen antiviralen Wirkstoffen reduziert.

MolScore-Antivirals modelliert am Computer, wie Wirkstoffe in den Lebenszyklus von Viren eingreifen und so die Ausbreitung der Viren stoppen. Viren besitzen charakteristische Stoffwechselwege. Kann eine Substanz einen dieser Stoffwechselwege hemmen, bzw. blockieren, so ist ein neuer Kandidat für die weitere Medikamenten-Entwicklung gefunden.

Das Expertensystem vereint unterschiedliche Modelle von Viren, so dass auch Wirkstoffe gegen spezielle Viren-Typen gefunden werden. So werden beispielsweise Neuraminidase-Hemmer gegen Influenza-Viren („Grippe“) ebenso erkannt wie Reverse-Transkriptase-Hemmer bei Retroviren (HIV).

Durch Mustererkennungsverfahren wurden Gemeinsamkeiten von antiviralen Wirkstoff-Klassen erkannt. Die so abgeleiteten Regeln und Muster sind Bestandteil des Expertensystems. Durch die Evaluierung des Expertensystems wurde gezeigt, dass bei der Fokussierung auf sinnvolle Substanzen bis zu 77% der Kosten eingespart werden können.

Über PharmaInformatic:

PharmaInformatic entwickelt Expertensysteme für forschende pharmazeutische Unternehmen. Die Plattform-Technologie des Unternehmens beinhaltet Millionen von Substanzen verknüpft mit experimentellen Daten und mehrere Tausend 3D-Modelle von Biomolekülen. Proprietäre Methoden der Chemieinformatik und Bioinformatik ermöglichen die Prognose des Wirkungsspektrum einer Substanz sowie dessen pharmakologische Eigenschaften. Weitere Informationen unter: www.pharmainformatic.com

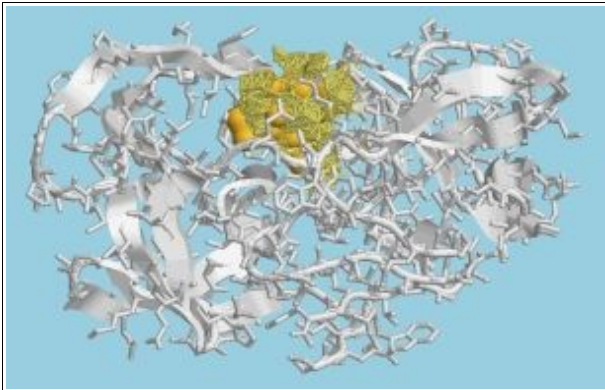
Kontakt:

Dr. Wolfgang Boomgaarden (email: pr@pharmainformatic.com)
PharmaInformatic Boomgaarden, Friesenstr. 36, 26721 Emden, Germany
Tel: +49 (0)4921 - 9933 -60

Bildmaterial:

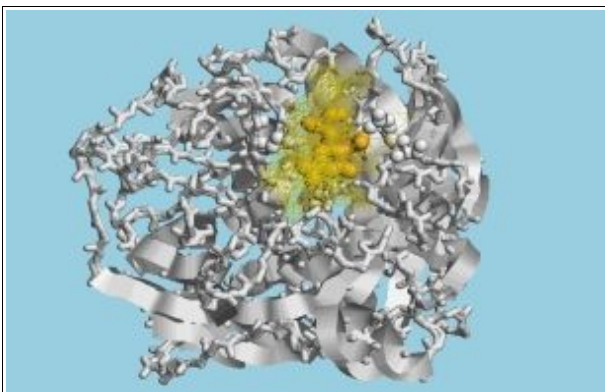
Download weiterer Graphiken unter: www.pharmainformatic.com/html/graphics.html

3D-Model der deaktivierten HIV-Protease, einem essentiellen Enzym vom HIV



Das antivirale Medikament (gelbe Kugeln) im Hohlraum der Protease (gelbes Gitter) inhibiert das Enzym und blockiert die Vermehrung des Virus.

3D-Model der deaktivierten Neuraminidase, einem essentiellen Enzym der Influenza-Viren ("Grippe")



Das antivirale Medikament Oseltamivir (gelbe Kugeln) im Hohlraum der Neuraminidase (gelbes Gitter) inhibiert das Enzym und blockiert die Vermehrung des Virus.