

Neue Computermethode für die Wirkstoffforschung

HITS-Wissenschaftlerinnen haben tauRAMD entwickelt, ein rechnerisches Werkzeug, das aus Kurzsimulationen die Verweildauer von Medikamenten im Zielmolekül prognostiziert. Sie veröffentlichen ihre Methode im Journal of Chemical Theory and Computation, das die Publikation auf die Titelseite der Juli-Ausgabe setzte. Die Software ist kostenfrei erhältlich.

Das Heidelberger Institut für Theoretische Studien (HITS) wurde 2010 von dem Physiker und SAP-Mitgründer Klaus Tschira (1940-2015) und der Klaus Tschira Stiftung als private, gemeinnützige Forschungseinrichtung ins Leben gerufen. Das HITS betreibt Grundlagenforschung in den Naturwissenschaften, der Mathematik und der Informatik. Dabei werden große, komplexe Datenmengen verarbeitet, strukturiert und analysiert und computergestützte Methoden und Software entwickelt. Die Forschungsfelder reichen von der Molekularbiologie bis zur Astrophysik. Die HITS Stiftung, eine Tochter der Klaus Tschira Stiftung, stellt die Grundfinanzierung der HITS gGmbH auf Dauer sicher. Die Mittel dafür erhält sie von der Klaus Tschira Stiftung. Gesellschafter des HITS sind neben der HITS Stiftung die Universität Heidelberg und das Karlsruher Institut für Technologie (KIT). Das HITS arbeitet außerdem mit weiteren Universitäten und Forschungsinstituten sowie mit industriellen Partnern zusammen. Die wichtigsten externen Mittelgeber sind das Bundesministerium für Bildung und Forschung (BMBF), die Deutsche Forschungsgemeinschaft (DFG) und die Europäische Union.

Originalpublikation:

Estimation of Drug-Target Residence Times by τ -Random Acceleration Molecular Dynamics Simulations. Daria Kokh*, Marta Amaral, Joerg Bomke, Ulrich Grädler, Djordje Musil, Hans-Peter Buchstaller, Matthias K. Dreyer, Matthias Frech, Maryse Lowinski, Francois Vallee, Marc Bianciotto, Alexey Rak, and Rebecca C. Wade*. J. Chem. Theory Comput., 2018, 14 (7), pp 3859–3869. DOI: 10.1021/acs.jctc.8b00230

*corresponding authors

Weitere Informationen:

<https://www.h-its.org/mcm-aktuelles/tauramd-de/> HITS Pressemitteilung

<https://pubs.acs.org/doi/abs/10.1021/acs.jctc.8b00230> Publikation (open-access license)

<https://www.h-its.org/downloads/ramd/> Software-Download