

## Simulationen vereinfachen die Injektion von Antikörpermedikamenten

**Monoklonale Antikörper helfen zum Beispiel gegen Autoimmun- oder Krebserkrankungen. Patienten müssen sie sich bislang alle paar Wochen per Infusion abholen. Einfacher wäre es, sie könnten sich die Medikamente zu Hause selbst unter die Haut spritzen. Das ginge aber nur, wenn die Medikamente zugleich hochkonzentriert, aber nicht zu dickflüssig wären. Um das zu bewerkstelligen, hat ein Team der Ruhr-Universität Bochum unter Leitung von Prof. Dr. Lars Schäfer vom Lehrstuhl für Theoretische Chemie und der Firma Boehringer Ingelheim Pharma eine schnelle und realistische Simulationsmethode entwickelt. Damit lässt sich das Verhalten von Formulierungen vorhersagen.**

Das Team berichtet im Journal of Physical Chemistry Letters vom 7. Dezember 2025.

### **Dickflüssiger als Olivenöl**

Will man ein Antikörpermedikament unter die Haut spritzen, kann man höchstens zwei Milliliter pro Spritze injizieren. Damit das Medikament ausreichend wirksam ist, muss diese kleine Menge Flüssigkeit eine sehr große Menge Antikörper enthalten. Dadurch wird das Medikament sehr dickflüssig. „Es ist nicht ungewöhnlich, dass die Viskosität höher ist als die von Olivenöl, was die subkutane Injektion sehr erschweren kann“, sagt Lars Schäfer. „Diese Herausforderung hat die Entwicklung und Anwendung von biopharmazeutischen Formulierungen lange Zeit erschwert.“

Um die Formulierungen zu verbessern, waren die Hersteller bislang weitgehend auf Versuch und Irrtum angewiesen: Tests unzähliger Kombinationen von Inhaltsstoffen und Bedingungen kosteten viel Zeit und Geld. „Daher haben wir uns entschlossen, chemisch realistische Computersimulationen zu verwenden, um die Konsistenz verschiedener Formulierungen vorhersagen zu können“, sagt Dr. Tobias Prass vom Lehrstuhl für Theoretische Chemie der Ruhr-Universität Bochum, Erstautor der Veröffentlichung. Die Forscher entwickelten einen grobkörnigen Simulationsansatz, der weitaus effizienter ist als atomistische Simulationen. „Unser Ansatz ist etwa tausendmal schneller als atomistische Simulationen und stimmt gleichzeitig weitgehend mit den experimentellen Ergebnissen überein“, erklärt Tobias Prass.

### **Zeit und Ressourcen sparen**

„Die Simulationen ergänzen und erklären nicht nur unsere experimentellen Ergebnisse“, sagt Dr. Michaela Blech, Mitarbeiterin der Boehringer Ingelheim Pharma GmbH & Co. KG. „Sie ermöglichen auch die rationale Konzeption neuer Experimente und können deren Ergebnisse vorhersagen, wodurch Zeit und Ressourcen gespart werden, da vielversprechende Kandidaten und Bedingungen bereits in einer frühen Entwicklungsphase herausgefiltert werden können.“ Mit der neuen Methode konnte das Forschungsteam zum Beispiel vorhersagen, wie bestimmte Zusatzstoffe – beispielsweise die Aminosäure Arginin – die Viskosität von Antikörperformulierungen verringern.

### **Förderung**

Die Forschung wurde von Boehringer Ingelheim Pharma GmbH & Co. KG und von der Deutschen Forschungsgemeinschaft im Rahmen der Exzellenzstrategie, EXC 2033 – 390677874 – RESOLV,

finanziert.

**Originalpublikation:**

Tobias Prass, Patrick Garidel, Michaela Blech, Lars Schäfer: Predicting the Dynamic Viscosity of High-Concentration Antibody Solutions with a Chemically Specific Coarse-Grained Model, in: The Journal of Physical Chemistry Letters, 2025, DOI: 10.1021/acs.jpcllett.5c03003, <https://doi.org/10.1021/acs.jpcllett.5c03003>