

**Profilbeskrivelse for samarbejde
med SMV'er inden for
kemoinformatikken
(sagsnr. 2106-06-0071)**



**Der indbydes til samarbejde om kemoinformatiske metoder
til dataanalyse af kemiske stoffer (lægemidler).**

CBS ønsker at etablere et forsknings samarbejde med 1-2 små eller mellemstore virksomheder (SMV'er). Arbejdet skal foregå henholdsvis på DTU og i virksomhederne.

Med udgangspunkt i SMV'ernes behov, er målet at videreudvikle og implementere vores kemoinformatiske metoder i virksomhederne, hvorved der spares penge i lægemiddeludviklingsprocessen. Projektet henvender sig derfor hovedsageligt til SMV'er som arbejder med udvikling af lægemidler, men kan også have relevans for andre bioteknologiske virksomheder. Overordnede projektskitser kunne være:

I forbindelse med udvikling af nye lægemidler, er det vigtigt at kunne klassificere kemiske stoffer baseret på funktionalitet, f.eks. for at kunne forudsige om et stof binder til bestemte lægemiddeltargets (molekylære receptorer). Ved CBS på DTU har vi betydelig erfaring med brug af forskellige klassificeringsalgoritmer, og en spændende mulighed er at indarbejde sådanne algoritmer inden for et fokusområde af interesse for den eller de deltagende virksomheder. Dette kunne f.eks. omhandle liganders vekselvirkning med andre familier af lægemiddeltargets, eller klassificering af kemiske stoffer i forhold til bestemte toksiske virkningsmåder.

Et andet muligt projekt fokuserer på implementering af metoder til forudsigelse af nøgleegenskaber, såsom opløselighed, toksicitet, drug-likeness, lead-likeness, etc. Der vil kunne udvikles et computerbaseret pre-screening system, som kan hjælpe den pågældende virksomhed til at foretage fokuserede valg af stoffer til testning for biologisk aktivitet. CBS har udviklet en række metoder der kan danne grundlag for sådant et samarbejde. Det er oplagt, at denne type af metoder har relevans for næsten alle virksomheder, der udvikler lægemidler.

En tredje projektmulighed er opbygning af rationelle systemer til organisering og opdatering af meget store stofbiblioteker. I takt med at der udvikles mere og mere effektive metoder til parallel syntese af molekyler, er der brug for nye metoder og systemer til opbevaring og opdatering af relevante data over stoffernes egenskaber. CBS-gruppen på DTU har stor erfaring med design af databaser og forudsigelse af stoffers egenskaber, hvilket giver spændende perspektiver for at udvikle og tilpasse denne type system til virksomhedens behov.

Yderligere information: <http://www.cbs.dtu.dk>

Kontakt: Professor Søren Brunak eller lektor Svava Ósk Jónsdóttir, Center for Biologisk Sekvensanalyse (CBS), BioCentrum-DTU, Bygning 208, tlf. 45 25 61 64, e-mail: svava@cbs.dtu.dk

Frist: 1. februar 2007