

CyBy²: Clevere Handhabung strukturbasierter Datensätze



Prof. Dr. Rainer Riedl,
Leiter Fachstelle
Organische Chemie und
Medizinalchemie,
rainer.riedl@zhaw.ch



Dr. Stefan Höck,
Wissenschaftlicher Mitarbeiter,
stefan.hoeck@zhaw.ch

Forscher am Institut für Chemie und Biologische Chemie (ICBC) der ZHAW Wädenswil entwickeln ein leistungsstarkes strukturbasiertes Werkzeug der Datenverwaltung für die Handhabung komplexer chemischer und biologischer Datensätze. CyBy² eignet sich als benutzerfreundliche IT-Lösung für das Projekt-Portfoliomanagement von Forschungsgruppen verschiedenster wissenschaftlicher Disziplinen, wobei gegenwärtig vor allem medizinalchemische Projekte und die funktionale Programmierung im Fokus stehen.

Cheminformatik als Schlüsselkompetenz in der Medizinalchemie

Als organische Synthesechemiker mit einem Fokus auf medizinalchemische Projekte sind sie Experten, wenn es um die organische Synthese und die Analyse von kleinen und neuartigen Molekülen an der Schnittstelle zwischen der Chemie und der Biologie geht. Aber auch auf dem Gebiet der Cheminformatik sind sie aktiv. Da medizinalchemische Projekte die Analyse von komplexen Datensätzen erfordern, beschäftigt man sich in der ICBC-Fachstelle mit der Entwicklung von IT-Lösungen für die Analyse umfangreicher Datensätze, wie sie bei der Entwicklung von neuen Wirkstoffen anfallen.

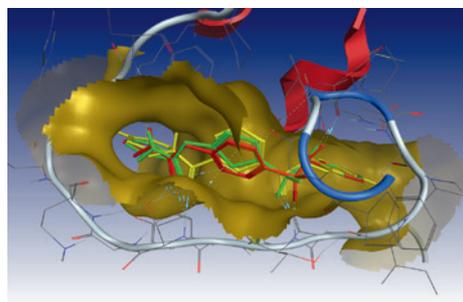


Abb. 1: Wirkstoffmoleküle im Zielprotein

Korrelation zwischen Struktur und Aktivität

Chemische Strukturen, kombiniert mit effizienten Visualisierungstools biologischer Daten sind essentiell für den Erfolg medizinalchemischer Projekte. Für eine erfolgreiche Handhabung dieser Forschungs- und Entwicklungsprojekte ist daher ein modernes und leistungsstarkes Datenverwaltungs-Werkzeug unerlässlich. Um die Wechselwirkungen zwischen Struktur und Aktivität in umfangreichen Datensätzen zu ermitteln, müssen Strukturdaten mit einer Vielzahl von funktionellen Daten kombiniert

werden können. Mit diesem Ziel vor Augen wurde CyBy², das strukturbasierte Werkzeug zur Verwaltung von chemischen und biologischen Daten, entwickelt.

Positives Feedback aus der Scientific Community

Die bisherigen Ergebnisse wurden in zwei wissenschaftlichen Publikationen veröffentlicht, die grosses Interesse in der Scientific Community erregten, was den Nutzen von CyBy² belegt (siehe www.icbc.zhaw.ch/organic-chemistry). Die Forscher ziehen eine positive Bilanz: Potenzielle Nutzniesser von CyBy² sind alle Wissenschaftler, welche mit strukturbasierten biologischen oder chemischen Daten arbeiten und diese analysieren, um Korrelationen aufzufinden. Der Vorteil dieser Softwarelösung liegt vor allem darin, dass alle Daten mit chemischen Strukturformeln verknüpft sind und die Daten sehr effizient analysiert werden können. Somit ist CyBy² das perfekte Werkzeug für den Umgang mit komplexen Datensätzen in medizinischer, pharmazeutischer und chemischer Forschung wie auch in den Materialwissenschaften.

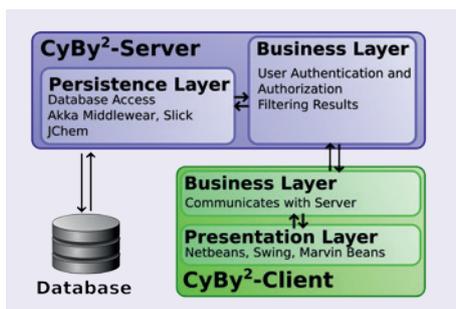


Abb. 2: CyBy²-Architektur



Abb. 3: Korrelation zwischen chemischer Struktur und biologischen Daten

Forschungsprojekt

CyBy²: A Structure-Based Data Management Tool for Chemical and Biological Data

Leitung: Prof. Dr. Rainer Riedl
Projektdauer: seit 2011
Projektvolumen: CHF 50 000.–