

Dresden, 2. September 2020

## PRESSEMITTEILUNG

### Dresdner Start-up macht Medikamente sicherer

PharmAI und 2bind entdecken Nebenwirkungen in Rekordzeit

Nebenwirkungen von Medikamenten können fatale Folgen haben. Deshalb ist es wichtig, sie frühzeitig zu erkennen. Genau das ermöglicht eine neue Methode des Dresdner Start-ups PharmAI und seines Partners, der 2bind GmbH aus Regensburg. Die beiden Unternehmen kombinieren dafür Künstliche Intelligenz und hocheffiziente biophysikalische Tests. Bisher stellte die frühe Identifikation unerwünschter Wirkungen von Arzneien eine enorme – mit hohem Ressourcenaufwand verbundene – Herausforderung dar und glich der sprichwörtlichen Suche nach der Nadel im Heuhaufen. Mit dem neuen Ansatz liegen Ergebnisse bereits nach acht Wochen vor. Das hilft Risiken der Wirkstoffforschung enorm zu senken.

PharmAI ist eine Ausgründung der Technischen Universität Dresden. Die entwickelte Software *DiscoveryEngine* des 2019 gegründeten Start-ups basiert auf der Analyse von Proteinstrukturdaten. Sie nutzt Informationen über die Beschaffenheit der Proteine im menschlichen Körper, von Viren oder anderen Krankheitserregern und extrahiert Wissen darüber, wie diese Eiweiße mit bekannten Wirkstoffen und anderen niedermolekularen Verbindungen in Wechselwirkung treten. Mittels cleverer Algorithmen und künstlicher Intelligenz sucht die Software unter vielen hunderttausend Kandidaten in einer Datenbank nach passenden Verbindungen zwischen Proteinen und Wirkstoffen. Bisher nutzte das Team von PharmAI diese Technik, um einen Screening-Workflow zu entwickeln, welcher dazu eingesetzt wird, neue Therapiemöglichkeiten zu finden, indem die *DiscoveryEngine* noch unbekannte Verbindungen zwischen Krankheiten und Wirkstoffen aufdeckt. „Nun haben wir unsere Technologie erstmals dafür verwendet, sogenannte Off-Targets aufzuspüren – also unerwünschte Wirkstoffziele, die zu Nebenwirkungen führen“, erklärt PharmAI-Geschäftsführer Dr. Joachim Haupt.

In einem aktuellen Projekt mit 2bind beschäftigte sich PharmAI mit dem Enzym MAPK14. Es ist in vielen Zelltypen vorhanden und unter anderem für die DNA-Reparatur von Bedeutung. In den vergangenen Jahren wurde deutlich, dass MAPK14 auch an der Autophagie, der zellulären Müllabfuhr, beteiligt ist und damit ebenfalls für die Krebstherapie von Interesse ist. Mittels der *DiscoveryEngine* suchten die Wissenschaftler Verbindungen zwischen einem sogenannten Kinase-Inhibitor namens SB203580 und anderen Proteinen. Kinase-Inhibitoren gehören zu den wirksamsten Mitteln gegen Krebs, weil sie das Tumorstadium bremsen können. Sie agieren jedoch nicht selektiv und können damit auch andere Enzyme ausschalten. Die Gefahr schädlicher und sogar potenziell tödlicher Nebenwirkungen ist deshalb groß. „Gemeinsam fanden wir mit unserem Verfahren sehr schnell genau solche unerwünschten Nebeneffekte“, erklärt Haupt weiter.

Durch den Einsatz der *DiscoveryEngine* stießen die Experten aus Dresden auf 13 Proteine, die potenzielle Off-Targets darstellten. Diese sollten im Anschluss im Labor getestet werden. Mit 2bind – einem Experten für die Validierung von durch künstliche Intelligenz erzeugten Vorhersagen – hat PharmAI dafür einen kompetenten Partner gefunden. „Wir bringen die tatsächlichen, physischen Off-Targets ins Labor, markieren diese mit einem Fluoreszenzmarker und testen die Bindung des Kinase-Inhibitors, mit welchem alles angefangen hat: SB203580,“ erklärt Dr. Maximilian Plach, CSO bei 2bind. Von den getesteten 13 Proteinen wurde für sechs ein Bindungsverhalten beobachtet, was einer außergewöhnlichen Trefferquote von 46 Prozent entspricht.

Die neu entwickelte Methode ist nicht nur effektiv, schnell und kostengünstig, sondern auch ressourcenschonend. „Für die Validierung der rechnergestützten Vorhersagen im Labor werden nur winzigste Mengen an Protein verwendet“, fügt Dr. Plach hinzu. Ein wichtiger Punkt, denn in der Regel stehen keine finanziellen Mittel und Zeit für die Produktion großer Proteinmengen zu Verfügung. Mit ihrem Service wollen PharmAI und 2bind deshalb auch in Zukunft dabei helfen, die Suche nach unerwünschten Nebenwirkungen in der Wirkstoffforschung zu revolutionieren. Die hier beschriebene neue Methode leistet einen signifikanten Beitrag dazu, die Medikamentenentwicklung sicherer zu machen.

Das **Foto zur Pressemitteilung** kann kostenlos für die Berichterstattung genutzt werden.

Bildunterschrift: Im internationalen Team von PharmAI bringen Christoph Leberecht (Software Engineer), Dr. Joachim Haupt (CEO) und Dr. Florian Kaiser (CTO) die Technologie voran (v.l.n.r.).

Bildquelle: Braun-Bunt Fotografie

### **Über PharmAI**

*Das 2019 gegründete Start-up PharmAI ist eine Ausgründung aus der Technischen Universität Dresden. Grundlage der Arbeit des Unternehmens ist die eigens entwickelte DiscoveryEngine. Auf der Basis von Proteinstrukturdaten identifiziert die Software in riesigen Datenbanken Wirkstoffkandidaten, indem sie Bindungen von Proteinen aus Menschen, Viren oder Krankheiten mit denen von Wirkstoffen vergleicht. Eine Art Puzzle, welches die Bindetaschen, die kleinen Vertiefungen auf Proteinen, ermöglichen. Die auf künstlicher Intelligenz basierte Technologie wird durch die Kunden der PharmAI GmbH dazu genutzt, um neue Wirkstoffe für Therapien von Krankheiten zu finden oder aber auch um unerwünschte Nebenwirkungen in kürzester Zeit aufzuspüren. Das Start-up hat seinen Sitz in Dresden und derzeit acht Teammitglieder.*

### **Über 2bind**

*Die 2bind GmbH, gegründet 2011 in Regensburg, bietet perfekt auf den Kunden zugeschnittene Dienstleistungen in biophysikalischer Analytik. Ihre Tätigkeitsbereiche umfassen unter anderem Medikamentenentwicklung, Antikörperforschung, Aptamercharakterisierung, Proteinbiophysik und Formulierungsentwicklung. Mit einem Portfolio modernster biophysikalischer Technologien ist 2bind in der Lage das komplette Analysespektrum von Affinität, über Kinetik und Thermodynamik, bis hin zu Stabilität und Formulierung hoch qualitativ und kosteneffizient anzubieten. Dieses Methodenportfolio umfasst unter anderem MicroScale Thermophoresis (MST), nano-Differential Scanning Fluorimetry (nanoDSF), Biolayer Interferometry (BLI), und Isothermal Titration Calorimetry (ITC). Ein dynamisches Team aus neun Wissenschaftlern sichert der 2bind GmbH schnelle Reaktionen auf die unterschiedlichsten Kundenbedürfnisse zu.*

### **Kontakte für Medienanfragen:**

#### **PharmAI GmbH**

Tatzberg 47  
01307 Dresden

Jana Mundus (PR Representative)

+49 351-41881626

press@pharm.ai

#### **2bind GmbH**

Am Biopark 11  
93053 Regensburg

Dr. Thomas Schubert (CEO)

schubert@2bind.com

+49 941 2000 0890