



Einladung zur 607. Vortragsveranstaltung

Am **Dienstag 12. Juli 2022 um 20.00 Uhr** spricht

Prof. Dr. Johannes Kirchmair

über das Thema

Computerbasierte Vorhersage des Metabolismus von Wirkstoffen

Der Vortrag findet online per Zoom statt.

Für die Bekanntgabe in Ihrem Kreis wären wir Ihnen dankbar. Gäste sind herzlich willkommen!

Hamburg, im Juni 2022

Der Vorstand

Das Stoffwechselsystem hat sich als wichtigstes Abwehrsystem des Organismus gegen toxische Substanzen entwickelt. Während die meisten Xenobiotika durch das Stoffwechselsystem in ungiftige Substanzen metabolisiert werden, haben einige der Stoffwechselprodukte toxische Wirkungen. Die Fähigkeit, das metabolische Schicksal kleiner Moleküle und die Toxizität der Metabolite vorherzusagen, ist daher von entscheidender Bedeutung für die Entwicklung sicherer und wirksamer Arzneimittel, Agrochemikalien und Kosmetika.

In diesem Beitrag werden zunächst die Möglichkeiten und Grenzen rechnergestützter Methoden für die Vorhersage (i) der Wechselwirkungen von Xenobiotika mit metabolisierenden Enzymen, (ii) der Atompositionen in einem Molekül, an denen Biotransformationen eingeleitet werden und (iii) wahrscheinlicher Metabolite erörtert. Viele dieser Werkzeuge sind heute leicht zugänglich und können sowohl Expert:innen als auch Laien wertvolle Hinweise geben.

Im zweiten Teil dieses Vortrags wird an Beispielen veranschaulicht, wie diese Werkzeuge im Labor eingesetzt werden können, um die Toxizität von Verbindungen und ihrer Metabolite vorherzusagen und zu rationalisieren.

Diese Veranstaltung wird im Rahmen der zertifizierten Fortbildung mit 2 Punkten bewertet.

Ass.-Prof. Dr. Johannes Kirchmair
Universität Wien
Department für Pharmazeutische Wissenschaften
Pharmazeutische Chemie
Josef-Holaubek-Platz 2 (UZA II)
1090 Wien/Österreich
T 43 1 4277-55104
johannes.kirchmair@univie.ac.at

Beruflicher Werdegang

Seit 03/2021 Assoziierter Professor für Chemieinformatik und Med. Chemie, Universität Wien/
Österreich
01/2020 –
02/2021 Assistant Professor für Chemieinformatik, Med. Chemie, Universität Wien/Österreich
2014 –
2018 Junior-Professor für angewandte Bioinformatik, Universität Hamburg
08/2018 –
12/2019 Assoziierter Professor für Bioinformatik, Universität Bergen (Norwegen)
12/2016 –
Juni 2018 Gastdozent am National Institute of Technology Warangal (Indien), der Università
degli Studi di Cagliari (Italien) und der Universität Wien (Österreich)
09/2013 –
08/2014 Wissenschaftlicher Mitarbeiter, ETH Zürich/Schweiz
2010 –
08/2013 Wissenschaftlicher Mitarbeiter, Universität Cambridge/Großbritannien
01/2010 –
09/2010 PostDoc-Stelle BASF SE, Ludwigshafen
2007 - 2009 Application Scientist Inte:Ligand GmbH, Wien/Österreich

Akademische Ausbildung

2004 – 2007 Promotion Leopold-Franzens Universität Innsbruck/Österreich
1999 – 2004 Studium der Pharmazeutischen Wissenschaften, Leopold-Franzens Universität, Inns-
bruck/Österreich

Forschungsschwerpunkt

Entwicklung und Anwendung computerbasierter Methoden für die Vorhersage der biologischen Ak-
tivitäten, des Metabolismus und der Toxizität von Wirkstoffen im Kontext der Arzneimittelentde-
ckung

Nächste Veranstaltung:

tba