

**Zeitschrift:** Horizonte : Schweizer Forschungsmagazin  
**Herausgeber:** Schweizerischer Nationalfonds zur Förderung der Wissenschaftlichen Forschung  
**Band:** 21 (2009)  
**Heft:** 81

**Artikel:** Frische Moleküle  
**Autor:** Gordon, Elisabeth  
**DOI:** <https://doi.org/10.5169/seals-968351>

#### Nutzungsbedingungen

Die ETH-Bibliothek ist die Anbieterin der digitalisierten Zeitschriften auf E-Periodica. Sie besitzt keine Urheberrechte an den Zeitschriften und ist nicht verantwortlich für deren Inhalte. Die Rechte liegen in der Regel bei den Herausgebern beziehungsweise den externen Rechteinhabern. Das Veröffentlichen von Bildern in Print- und Online-Publikationen sowie auf Social Media-Kanälen oder Webseiten ist nur mit vorheriger Genehmigung der Rechteinhaber erlaubt. [Mehr erfahren](#)

#### Conditions d'utilisation

L'ETH Library est le fournisseur des revues numérisées. Elle ne détient aucun droit d'auteur sur les revues et n'est pas responsable de leur contenu. En règle générale, les droits sont détenus par les éditeurs ou les détenteurs de droits externes. La reproduction d'images dans des publications imprimées ou en ligne ainsi que sur des canaux de médias sociaux ou des sites web n'est autorisée qu'avec l'accord préalable des détenteurs des droits. [En savoir plus](#)

#### Terms of use

The ETH Library is the provider of the digitised journals. It does not own any copyrights to the journals and is not responsible for their content. The rights usually lie with the publishers or the external rights holders. Publishing images in print and online publications, as well as on social media channels or websites, is only permitted with the prior consent of the rights holders. [Find out more](#)

**Download PDF:** 06.02.2026

**ETH-Bibliothek Zürich, E-Periodica, <https://www.e-periodica.ch>**

# Frische Moleküle

Ein Team von Chemikern der Universität Bern hat eine Datenbank mit rund 960 Millionen Molekülen geschaffen. Das Ziel ist es, neue Wirkstoffe zu finden, die eines Tages im Arzneimittelbuch einen Platz bekommen.

VON ELISABETH GORDON

**N**eue Medikamente im Kampf gegen noch unheilbare Krankheiten oder zur Verbesserung bestehender Behandlungen zu entdecken, ist das Ziel der pharmazeutischen Industrie – und auch von Jean-Louis Reymond vom Departement für Chemie und Biochemie der Universität Bern. Seine Arbeit beginnt allerdings ganz am Anfang des langen Weges hin zu neuen Medikamenten.

Auf der Suche nach neuen Wirkstoffen ging man lange von natürlichen Mitteln mit bekannter Wirkung aus: Man analysierte die Mittel, um den verantwortlichen Wirkstoff zu bestimmen, und versuchte, diesen im Labor zu synthetisieren. Jean-Louis Reymond und sein Team beschreiten den umgekehrten Weg. Sie beginnen bei den Molekülen, den «chemischen Bausteinen», auf denen Medikamente beruhen, und versuchen, darunter jene zu finden, die eine interessante pharmakologische Wirkung aufweisen könnten.

«Wir wollten eine abschliessende Liste aller möglichen Moleküle erstellen», erklärt der Chemieprofessor. Mit sehr leistungsfähigen Computern machten sich die Forschenden daran, wie mit Lego-Bausteinen alle denkbaren Gerüste organischer Moleküle aus den wichtigsten Atomen (Kohlenstoff, Stickstoff, Sauerstoff und Fluor) virtuell zusammenzubauen. Einzige Einschränkung waren die Gesetze der Chemie und der Pharmakologie. Vor zwei Jahren hatten sie eine Datenbank mit mehr als 26 Millionen kleinen Molekülen mit höchstens 11 Atomen erstellt. Dann wandten sie sich den Molekülen mit bis zu 13 Atomen zu und erhielten rund 960 Millionen! «Das ist die obere Grenze, die sich mit den heutigen Rechnerleistungen erreichen lässt», hält Jean-Louis Reymond fest. So oder so ist das Ergebnis beeindruckend. Und die Datenbank, die akademischen Laboratorien nun bereits zur Verfügung steht, hat auch das Interesse von pharmazeutischen Unternehmen geweckt.

## Virtuelles Sieben

Die Berner Forschenden bleiben jedoch nicht auf halbem Weg stehen. Sie haben damit begonnen, ihre Sammlung zu erkunden und jene Moleküle virtuell «herauszusieben», die von pharmakologischem Interesse sind. Konkret geht es darum, mit Hilfe von Computerprogrammen die chemischen Strukturen

der Datenbank mit den Molekülen des Lebens, den Proteinen, zusammenzubringen und zu prüfen, ob sie aneinander binden und interagieren können. «Von allen Molekülen unserer Datenbank sind 20 bis 30 Prozent potenziell interessant», betont Prof. Reymond. Diese sollen im Labor hergestellt werden.

Wozu könnten sie dienen? In erster Linie für die Behandlung von Beschwerden des Nervensystems, die im Allgemeinen eher auf kleinen Molekülen beruht. Um auf Neurotransmitter wirkende Verbindungen wie Glutamat oder Acetylcholin aufzuspüren, die eine wichtige Rolle bei neurologischen Erkrankungen spielen, arbeiten die Chemiker eng mit Medizinern in Bern und Genf zusammen. Es gibt zum Beispiel bereits therapeutisch eingesetzte Wirkstoffe, die den Acetylcholinrezeptor blockieren. «Davon liessen wir uns inspirieren: Wir suchten in unserer Datenbank nach analogen Verbindungen, die sich viel einfacher synthetisieren lassen – und haben bereits 700 000 Kandidaten gefunden», erklärt der Forscher.

Der Weg von den virtuellen Verbindungen bis zu den zugelassenen Medikamenten ist noch lang und steinig. Mit ihrer sehr grundlegenden Arbeit wollten die Forschenden aber vor allem einen völlig neuen Weg für die Suche nach innovativen Stoffen aufzeigen. «Und unser Ansatz funktioniert», freut sich der Wissenschaftler.

**Neuschöpfung im Modell:**  
Eines der Moleküle, die  
Jean-Louis Reymond (im  
Spiegelbild) am Computer  
kreiert hat.

