



## Virtuelle Medikamententests

Um das Verhalten eines Wirkstoffes in einem lebenden Organismus zu simulieren, arbeiten pharmazeutische Unternehmen zunehmend mit virtuellen Medikamententests. Dies ist möglich durch den Einsatz computergestützter Vorhersagemodelle, die die Arzneimittelforschung auf ein neues Level anheben.

Doch auf welche Weise funktioniert die Simulation und was wird dafür benötigt?

Mit Hilfe einer Simulationssoftware ist es möglich alle Prozesse die von der Aufnahme eines Wirkstoffes im Körper über dessen Verteilung und Verstoffwechslung bis hin zur Ausscheidung zu berücksichtigen und nachzustellen. Die Simulation ermöglicht eine datenbasierte Prognose, die daraufhinweist welchen Weg die Substanz im Organismus - nachdem sie zugeführt wurde - einschlägt. Zusätzlich liefert es wichtige Erkenntnisse darüber, wie schnell und durch welches Organ der Wirkstoff abgebaut wird, als auch Informationen über die Wirkung der Konzentration. Die Technologie ermittelt diese Vorhersagen auf Basis einer Datenbank, in der eine Vielzahl an spezifischen Kennzahlen mehrerer 10.000 Substanzen hinterlegt ist. Diese werden unter anderem auf Eigenschaften wie Löslichkeit, Molekulargewicht oder Proteinbindung untersucht. Zur weiteren Spezifikation kann die Simulation zwischen vier Spezies –Maus, Ratte, Hund und Mensch – unterscheiden, sodass auch hier konkrete Aussagen über den jeweiligen Organismus getroffen und vorhergesagt werden können.

Die Simulation liefert jedoch noch nicht alle Informationen, die für eine genaue Aussage hinsichtlich des virtuellen Medikamententest erforderlich sind, weshalb eine zusätzliche Auswertung des Koagulationssimulators, der die Blutgerinnung virtuell abbilden kann, benötigt wird. Hierbei handelt es sich um ein pharmakodynamisches Computermodell, das den Einfluss von pharmazeutischen Wirkstoffen auf die Blutgerinnung virtuell abbildet. Beim Koagulationsprozess wird dabei simuliert, wie der Körper bei Verletzungen die Blutung stillt – von Gerinnungsfaktoren über den Wundverschluss bis hin zum Zusammenspiel mit anderen Proteinen. Basierend auf diesem virtuellen Prozess kann somit die Wirkung von Arzneimitteln untersucht und getestet werden. Gleichzeitig können Forscher die Parameter verändern und anpassen, um die gewünschten Reaktionen hervorzurufen und durch die Prognose simulieren zu lassen.

### INNOVATIVE TECHNOLOGISCHE ANSÄTZE!

- ◇ **Unternehmen:**  
Bayer AG
- ◇ **Technologische Basis:**  
Simulationssoftware PK-Sim & Koagulationssimulator
- ◇ **Anwendungsgebiet:**  
Forschung & Entwicklung von Arzneimitteln
- ◇ **Vorteile:**  
Simulation und Vorhersage der Wirkung von pharmazeutischen Wirkstoffen im menschlichen Organismus  
  
Reduzierung von Tierversuchen  
  
Effizientere Arzneimittelentwicklung  
  
Zielgerichteter und sicherere Planung klinischer Studien
- ◇ **Website:**  
<https://www.bayer.com/>

Sie interessieren sich für Innovationen & Technologien aus der Medizintechnik und/oder pharmazeutischen Industrie?

Dann sollten Sie einen Blick in unsere arcoro SNAPS Bibliothek unter [www.arcoro.de/Snaps/](http://www.arcoro.de/Snaps/) werfen! Hier finden sie stets aktuelle Beiträge zu technologischen Anwendungen und Neuerscheinungen!

© arcoro GmbH • [www.arcoro.de](http://www.arcoro.de)



Your Connection  
to MedTech & Pharma  
Expertise