

Revolutioniert KI die Erforschung neuer Wirkstoffe?

Wofür benötigen Bakterien Schalter?

In ihrer natürlichen Umgebung werden Bakterien mit einer Vielzahl von Stoffen konfrontiert. Einige davon sind nützlich (Nährstoffe), andere schädlich (Gifte). Um zu überleben, müssen Bakterien gefährliche Gifte von wichtigen Nährstoffen unterscheiden.

Eine Möglichkeit sind sogenannte **Riboswitches** – winzige molekulare RNA basierte Schalter, die mittels ihrer 3D-Struktur kleine Moleküle direkt erkennen können. Bindet ein passendes Molekül an den hochspezifischen Schalter, wird dieser aktiviert. Damit kann das Bakterium blitzschnell reagieren und lebensrettende Prozesse (wie die Giftentsorgung) aktivieren oder andere Prozesse stoppen.^{1,2,3}

Die Rolle der Künstlichen Intelligenz (KI)

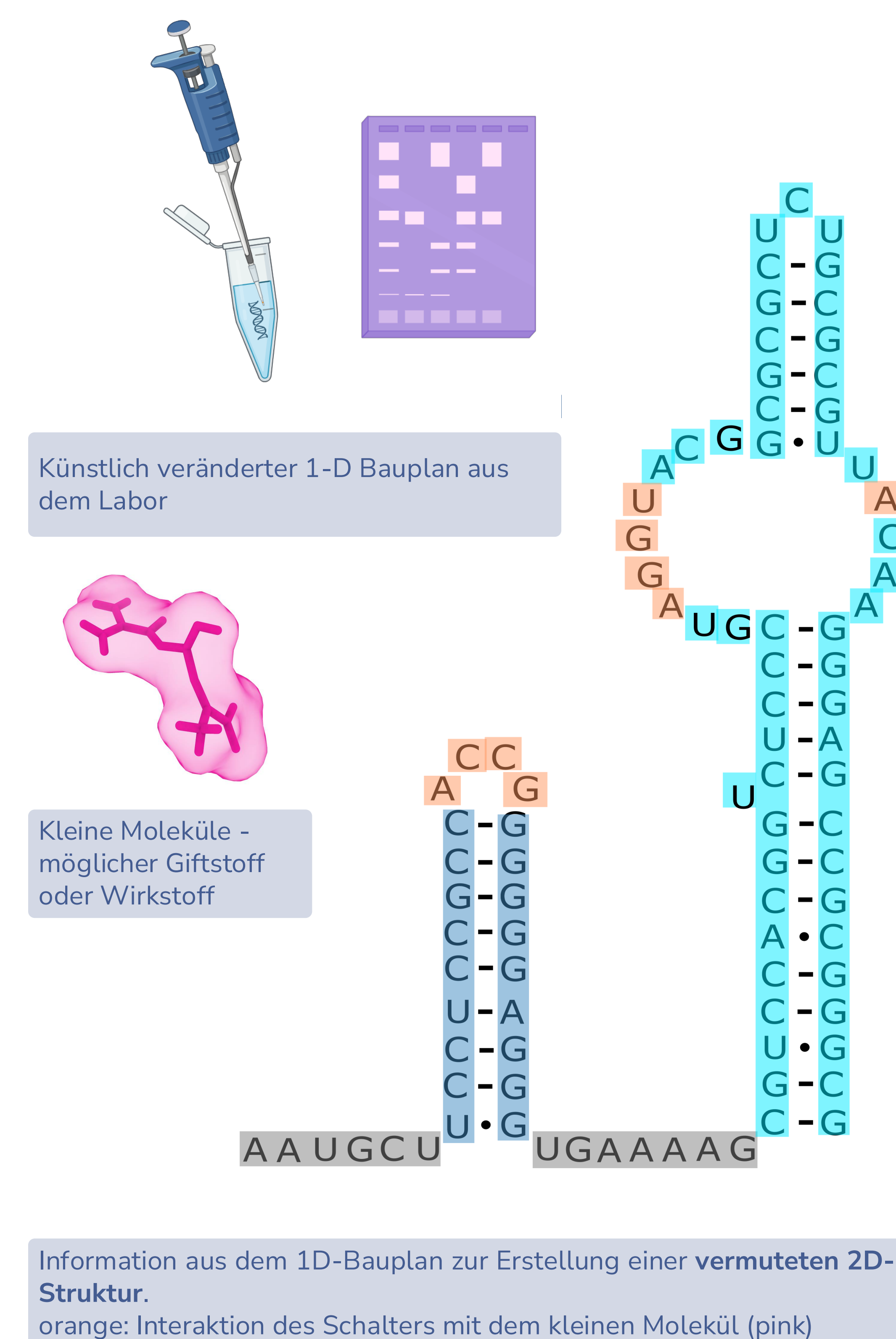
Aus dem Labor liegen ein 1D-Bauplan (RNA-Sequenz) und die Hypothese einer 2D-Struktur vor. Zur Entschlüsselung des komplexen 3D-Bauplans kommt KI zum Einsatz:

Modellierung & Validierung: Die KI generiert mögliche 3D-Modelle, die anschließend auf Funktionalität geprüft und in Simulationen mit Laborergebnissen abgeglichen werden.

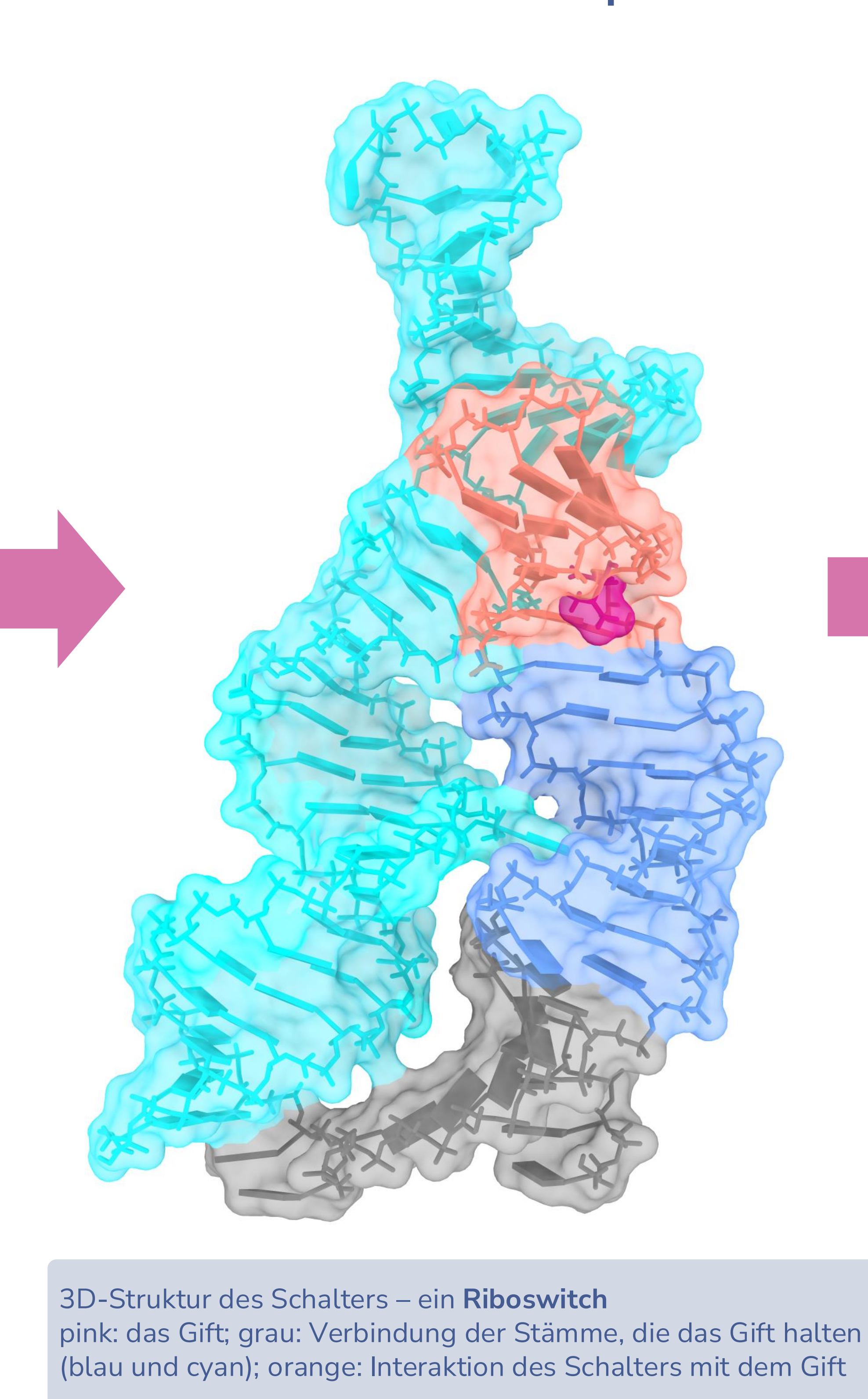
Herausforderung: Die KI AlphaFold 3 ist derzeit auf Proteine optimiert und bei RNA/DNA-Strukturen noch unzureichend trainiert.^{4,5}

Problemstellung: Wie können wir die Vorhersagen der KI filtern und validieren?

Schritt 1: Informationen aus dem Labor



Schritt 2: 3D Modell mit AlphaFold 3



Schritt 3: Dynamische Simulation – Wie bewegt sich das Modell?

Simulation der 3D Modellgestaltung

Für die Simulation wird dieses 3D Modell nun in eine virtuelle Wasserbox gesetzt. Dazu kommen stabilisierende Ionen (NaCl), die die Umgebung in dem Bakterium nachahmen.

Über die QR Codes sind vier Videos (A1, A2, B, C) abzurufen.

- A: Simulationsdarstellung des Schalters
- B: Veranschaulichung der NaCl-Menge
- C: Vollständige Simulation Grundlage der Ergebnisanalyse

Simulation des Schalters: Molekül bleibt im Schalter

Simulation des Schalters: Molekül verlässt den Schalter



Die Lösung: Ein physikalischer Realitätscheck

Eine Computersimulation hilft uns dabei, die 3D-Struktur zu verstehen und zu prüfen. Sie ist eine **Annäherung der KI** und durch die Simulation wird dieser Vorschlag mit physikalischen Berechnungen auf die Probe gestellt.

AlphaFold 3 liefert uns eine **Momentaufnahme** - wie ein Foto aus einem Video. Die RNA ist aber sehr beweglich. Die Simulation ist also ein Stresstest, ob der Bauplan auch in 3D unter physikalischen Bedingungen funktioniert. Außerdem kann mit diesem Modell getestet werden, wie ein Giftstoff – **z.B. ein zukünftiger Wirkstoff** – mit dem Schalter interagiert.⁶



Literatur

Der Blick in die Zukunft

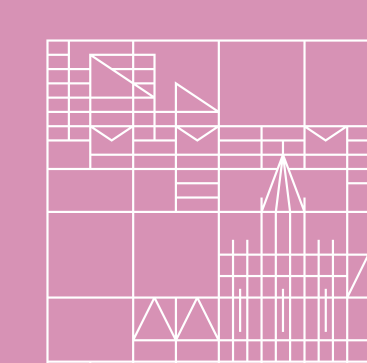
Dieser kombinierte Ansatz aus KI und Simulation reduziert den zeitlichen und finanziellen Aufwand zukünftiger Forschung. Durch das präzise digitale Vorfiltern wird die enorme **Vielzahl möglicher Strukturen drastisch eingegrenzt**, sodass im Labor nur noch die vielversprechendsten Wirkstoffe auf ihre Funktionalität experimentell getestet werden müssen.^{7,8}

Generative KI bietet mächtige und einflussreiche Werkzeuge für die Wissenschaft. Es ist dabei wichtig, dass diese Werkzeuge **offen und frei** verfügbar sind. Ebenso wichtig ist der **richtige Umgang** mit diesen Werkzeugen. Nur wenn wir in Deutschland offene KI-Modelle und die **Ausbildung** im Umgang mit KI fördern, können wir unsere **globale Wettbewerbsfähigkeit** und die **Wissenschaftsfreiheit** sicherstellen.



Video zum Poster

Universität
Konstanz



Ein Beitrag von:

Inken Isa Berlin
Universität Konstanz
AG Peter / AG Hartig
inken.berlin@uni-konstanz.de

