

## Neue Antibiotika durch KI und Synthetische Biologie

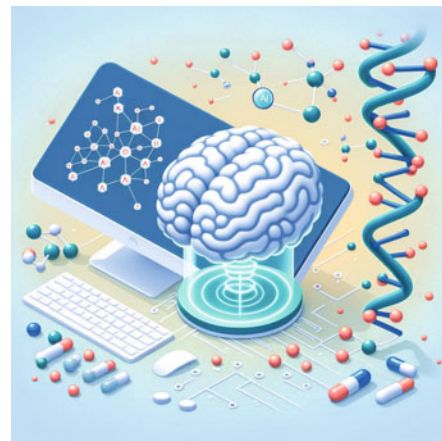
DOI: 10.1007/s12268-024-2097-x  
© Springer-Verlag GmbH 2024

**Methoden der Künstlichen Intelligenz (KI) spielen mittlerweile in der Wirkstoffforschung eine entscheidende Rolle, um neue bioaktive Substanzen zu identifizieren und die besten Kandidaten zu priorisieren. Bei der Suche nach neuen Antiinfektiva kombinieren Forschende zellfreie Proteinbiosynthese und Deep Learning zur schnellen Entdeckung neuer antimikrobieller Peptide.**

■ Amir Pandi *et al.* (Nat Commun (2023) 14:7197) nutzten Deep Learning, um Tausende antimikrobieller Peptide *in silico* zu entwerfen, und verwendeten zellfreie Proteinbiosynthese zur Produktion und zum Screening dieser Peptide. Zunächst generierten sie mithilfe von *deep generative variational autoencoders* 500.000 neue antimikrobielle Peptide im Computer. Durch prädiktives Deep Learning konnten sie 500 Kandidaten mit einer „gut“ vorhergesagten Bioaktivität zur experi-

mentellen Validierung priorisieren. Dabei erwiesen sich 30 Kandidaten als vielversprechend. Nach weiterer Charakterisierung mithilfe von Simulationen und chemischer Synthese sowie der Bestimmung der antimikrobiellen Aktivität identifizierten sie sechs mögliche Antiinfektiva. Diese zeigen ein relativ breites Wirkungsspektrum mit Aktivitäten auch gegen multiresistente Pathogene. Obwohl die Aktivität im Sinne von minimalen Hemmkonzentrationen eher moderat ist, demonstriert die vorgestellte Methode die Machbarkeit, bioaktive Peptide innerhalb eines Tages effizient und kostengünstig zu produzieren und zu testen.

→ *Künstliche Intelligenz spielt bei der Identifikation neuer Wirkstoffkandidaten, aber auch darüber hinaus in allen weiteren Schritten der Wirkstoffentwicklung eine essenzielle Rolle. Die Studie von Pandi et al. reiht sich ein in mehrere vielversprechenden Studien der jüngeren Vergangenheit, die das Potenzial der KI in der Pharmazeutischen Forschung*



**Abb.:** Symbolisches Bild, das die Kopplung von KI und Wirkstoffdesign zeigt, generiert mit DALL-E.

*demonstrieren, auch wenn der Weg zum klinischen Kandidaten noch recht weit ist.*

**Andreas Keller und Rolf Müller,  
Helmholtz-Institut für Pharmazeutische  
Forschung Saarland (HIPS),  
rolf.mueller@helmholtz-hips.de** ■