Karl Gruber untersucht Struktuen von biologischen Makromolekülen und deren Dynamik. Eines der Ziele ist, Enzymvarianten mit maßgeschneiderten Eigenschaften herzustellen. Ein umfassendes Wissen darüber kann zum Beispiel die Entwicklung von Medikamenten unterstützen. Eine wichtige Voraussetzung dafür ist, Ähnlichkeiten in Proteinstrukturen zu identifizieren. Dafür nutzen die ForscherInnen neuartige Computeralgorithmen, die Bindetaschen in Molekülen aufspüren. Ihre Funktionsweise gut zu verstehen, hilft, Nebenwirkungen von Medikamenten besser vorherzusagen.

#### Noch eine Frage für die Zukunft:

#32

# Wie macht man Moleküle nach Maß?

#### WELCHE GLOBALE HERAUS-FORDERUNG KÖNNTE IHRE FORSCHUNG LÖSEN?

Wenn wir die Funktionen von Proteinen besser verstehen, ist das für unterschiedliche Anwendungen extrem hilfreich. Chemische Prozesse können dadurch beispielsweise in Zukunft umweltfreundlicher gestaltet werden.

# WIE STEHEN DIE CHANCEN AUF ERFOLG?

Wir sind sehr zuversichtlich, dass wir mit unserem Ansatz Ähnlichkeiten zwischen Proteinen auf funktionaler Ebene erkennen können, die sonst übersehen werden würden. Damit generieren wir ein immer umfassenderes Basiswissen, das neue Entwicklungen vorantreibt.

#### **MIT WEM KOOPERIEREN SIE?**

Am Standort arbeiten wir sehr erfolgreich mit ExpertInnen aus den Bereichen Chemie, Biochemie und Biotechnologie über die universitätsübergreifenden Initiativen BioTechMed-Graz und NAWI Graz zusammen. Die von mir mitgegründete Firma Innophore – ein spin-off der Universität Graz und des acib – kooperiert aktuell mit global playern wie Google oder Harvard, um potenzielle Wirkstoff-KandidatInnen gegen das Coronavirus zu identifizieren.

### WARUM FORSCHEN SIE AN DER UNIVERSITÄT GRAZ?

Mit der Etablierung des Profilbildenden Bereichs BioHealth hat die Universität Graz exzellente Voraussetzungen für interdisziplinäre Spitzenforschung im Bereich der Life Sciences geschaffen. Darüber hinaus profitiert der Wissenschaftsstandort Graz sehr von der gemeinsamen Nutzung von Großgeräten.

#### **KEY FINDING**

Wir erforschen die Beziehung zwischen der Struktur eines Proteins und dessen Funktion bis ins kleinste Detail. Basierend auf jahrelanger Vorarbeit haben wir eine bioinformatische Methode entwickelt, mit der wir Proteinstrukturen auf eine neuartige Weise vergleichen können. Dadurch wird die sonst schwierige Suche nach funktionalen Ähnlichkeiten merklich einfacher. Und wir können so zum Beispiel auch erkennen, inwieweit die Proteine miteinander oder mit kleinen Molekülen interagieren.

We work for tomorrow

www.uni-graz.at



Karl Gruber investigates the structures of biological macromolecules and their dynamic interactions. One of his goals is to produce enzyme variants with customized properties. Learning much more about these, for example, can support the development of medications. To study these properties effectively, it's necessary to identify similarities in the protein structures. The researchers use novel computer algorithms to do so, detecting binding pockets in the molecules. Understanding how these pockets really work helps researchers to better predict medication side effects.

#### Another question with an eye to the future:

#32

# How do you make mole-cules to measure?

## WHAT GLOBAL CHALLENGES COULD YOUR RESEARCH SOLVE?

It is extremely helpful to gain a better understanding of protein functions for different applications. For example, these research findings can help us make chemical processes more environmentally friendly in the future.

# WHAT ARE THE OPPORTUNITIES FOR SUCCESS?

We are highly confident that our approach will enable us to identify similarities between proteins at a functional level – similarities that would otherwise be overlooked. In this way, we are creating an increasingly comprehensive knowledge base that will drive new developments.

# WITH WHOM DO YOU COOPERATE?

Locally, we are cooperating very successfully with experts from the fields of chemistry, biochemistry and biotechnology through the inter-university initiatives BioTechMed-Graz and NAWI Graz. Innophore – a spin-off from the University of Graz and the acib – is currently cooperating with global players such as Google and Harvard to identify potential drug candidates for the coronavirus.

# WHY DO YOU CONDUCT RESEARCH AT THE UNIVERSITY OF GRAZ?

By establishing the Field of Excellence BioHealth, the University of Graz has created fantastic conditions for high-quality interdisciplinary research in the life sciences. In addition, Graz is a great location for scientific research, because the largescale facilities can be used jointly.

#### **KEY FINDING**

We investigate the relationship between the protein structure and its function in great detail. Based on years of research, we have developed a bioinformatics method that we can use to compare protein structures in new and exciting ways. This considerably smooths the path that leads to the identification of functional similarities. And we can also see, for example, how extensively proteins interact with one another or with other small molecules.

We work for tomorrow

www.uni-graz.at

