

FIRMENPORTRAIT: QUATTRO RESEARCH (MARTINSRIED)

Gut organisiert per Mausklick

In Martinsried tüfteln die Techniker und Wissenschaftler von Quattro Research an verschiedenen Computerprogrammen, um Forschern und Medikamentenentwicklern den Laboralltag zu erleichtern.

Jeder nutzt sie täglich in Labor und Büro, ohne sich allzu große Gedanken darüber zu machen: Computerprogramme. Erst wenn sie nicht mehr funktionieren, merken wir, wie wichtig die elektronischen Helferlein inzwischen geworden sind: Datenanalyse, Auswertung, Protokollieren – aber auch Messgeräte selbst laufen inzwischen nicht mehr ohne Einsen und Nullen. Oft sind die Probleme in den Forschungslabors recht speziell, und es findet sich keine kommerzielle Lösung (oder diese ist zu teuer). Ein Gerät Marke Eigenbau schafft Abhilfe, oder der Techie aus dem Nachbarlabor hilft mit kleinen Makros und Softwareerweiterungen. Und hin und wieder verselbständigen sich solche Entwicklungen und finden ihren Weg in die große, weite Welt.

So oder so ähnlich muss es gewesen sein, als sich eines Tages ein Grüppchen von Softwareentwicklern bei der Martinsrieder Biotechfirma 4SC zusammensetzte und entschied: Die Zeit – und der Markt – sind reif für unsere Software. Unter dem Dach des börsennotierten Medikamentenentwicklers, der dieses Jahr sein zwanzigjähriges Bestehen feiert, war es zu eng geworden für Markus Weisser, Bernhard Schirm und Kollegen. Die beiden Wissenschaftler hatten sich bei 4SC kennen gelernt und arbeiteten dort an Ideen, um die reichlich anfallenden Daten des Biotechunternehmens zu zähmen. Heraus kam dabei Quattro/suite, ein Vierkomponenten-Datenmanagementsystem. Auch andere Firmen hätten Interesse an dem ‚Software-Kleeblatt‘ angedeutet, ergänzt Schirm beim Gespräch mit *Laborjournal*. Und so wurden im Jahr 2004 aus den beiden 4SClern die neuen Geschäftsführer von Quattro Research, welches sich fortan um Software-Entwicklungen sowie IT-Dienstleistungen für Forschung und Pharma kümmerte.

Auf eigenen Beinen

Weit ist das Team von Quattro Research nicht gekommen – zumindest räumlich. Die Geschäftsräume liegen Luftlinie keine hundert Meter vom früheren Arbeitgeber 4SC entfernt, eingebettet im Münchener Life-Science-Stadtteil Martinsried. Aber die Technologiefirma steht sicher auf eigenen Beinen. Vor dreizehn Jahren zu dritt gestartet, beschäftigt Quattro Research heute knapp 25 Mitarbeiter, davon einige in der jüngst gegründeten Tochterfirma in San Francisco. „Wir sind ein klassisches

Unternehmen, wir leben von dem, was wir erwirtschaften“, berichtet Chemiker Schirm und fügt schmunzelnd hinzu: „Es kann sein, dass wir im ersten Jahr 200, 300 Euro im Minus waren. Aber seitdem sind wir profitabel.“ Er führt das darauf zurück, dass Quattro Research erfolgreich eine Nische besetzt habe. Es sei nie das Ziel gewesen, durch übermäßiges Wachstum in Konkurrenz mit anderen Anbietern zu treten.

„Wir sind gerne spezialisiert“, bringt es Cathrin Pautsch auf den Punkt. Die Molekularbiologin arbeitet seit drei Jahren als ‚Life Science Business Consultant‘ bei Quattro Research und stellt damit nach eigenen Angaben die Schnittstelle zwischen Entwickler und Kunde dar.

Was will der Kunde eigentlich?

Zu letzteren zählen die Martinsrieder nicht nur ihren ehemaligen Arbeitgeber, sondern große und kleine Firmen aus Pharma- und Chemieindustrie sowie Biotechunternehmen und Start-Ups. Wichtig sei anfangs immer, genau festzustellen, was der Kunde überhaupt möchte. Biologe Weisser verdeutlicht: „Oft sind Begriffe unklar, wie zum Beispiel LIMS [Labor-Informationssystem; Anm. d. Red.]. Für den Kliniker ist ein LIMS vielleicht etwas anderes als für den Wissenschaftler.“

Erst wenn Vorstellungen und Definitionen geklärt seien, beispielsweise im Rahmen eines Workshops, so Pautsch, würde über eine geeignete Zusammenstellung verschiedener Produkte nachgedacht, oder sogar über die Entwicklung neuer Programme. „Zunächst suchen wir gemeinsam mit dem Kunden nach existierenden Lösungen, auch von anderen Anbietern“, so Schirm. Eigene oder weitere kommerzielle Programme integrieren die Entwickler von Quattro Research dann in vorhandene Systeme. „Wir haben beispielsweise gerade ein Pathologieprojekt abgeschlossen, bei dem es darum ging, Paraffinblöcke zu verwalten. Es gab bereits ein System, welches von uns um Komponenten zur Lagerungsautomatisierung erweitert wurde“, berichtet Schirm.

Müssen Ergebnisse aus Hochdurchsatzscreenings, Proteinreinigungen oder Bindungsstudien erfasst werden, kommen sogenannte Data Warehouses zum Einsatz. „Das ist eine Art Metadatenbank, in der wir Daten aus allen möglichen Datenquellen zusammenfassen“, erklärt Schirm. „Dies erlaubt dem Anwender einen schnellen Zugriff auf Experimentbe-

schreibungen, elektronisches Laborjournal, Molekülregistrierung und vieles mehr.“ Gerade in der Pharmabranche, wo Wirkstoffentwicklungen teilweise über viele Jahre laufen, seien gute Datenbanken immanent wichtig, ist Schirm sicher. Hier läge auch der Unterschied zu bereits vorhandenen Datenbanken, eben: Data Warehouses, die zum Beispiel Banken und Versicherungen nutzten, ergänzt Weisser. Diese würden sich für Monats- und Quartalsreports interessieren. In der Medikamentenentwicklung kommt es manchmal auf einen einzelnen Datenpunkt an: „Hat die Substanz in diesem Versuch eine Nebenwirkung gezeigt oder nicht?“, führt Weisser beispielhaft an. Allzu grobes Zusammenfassen sei da oftmals kontraproduktiv. Deshalb sei es wichtig, dass die Mitarbeiter von Quattro Research nicht nur programmieren könnten, sondern auch wissenschaftliches Verständnis mitbringen. So tummeln sich an der Fraunhoferstrasse 18a neben einem ‚reinen‘ Informatiker vor allem Chemiker, Biologen, Bio- und Medizininformatiker.

Bunte Mischung

Generell seien die Aufgaben sehr vielfältig und breit gefächert, sind die drei Wissenschaftler sich einig: Dienstleistungen wie die Integration oder Trennung von geistigem Eigentum nach Unternehmensfusionen oder Spin-Offs; Aufbau, Umzug oder Anpassung von Datenbanken; Systeme zur Patentverwaltung oder Biomolekülregistrierung.

Insbesondere letzteres ist nicht trivial. Klassische Chemiedatenbanken könnten nur mit einer begrenzten Anzahl von Atomen umgehen, umschreibt Schirm die Problematik. Komplexe Verbindungen wie Antikörper oder Antikörper-Wirkstoff-Konjugate (ADC) seien schlicht zu groß. Dies gelänge nun aber mithilfe der HELM-Notation. Der HELM-Standard (*Hierarchical Editing Language for Macromolecules*) ermöglicht die exakte Beschreibung großer Moleküle, ausgehend von Atomen und Monomeren, über einfache bis hin zu komplexen Polymeren – egal, ob es sich um RNA, DNA, Peptide oder Proteine handelt.

„Wenn Sie einen Antikörper haben, ist das ein komplexes Polymer aus schweren und leichten Ketten. Das kann man herunterbrechen auf Domänen, die wiederum weiter auf die Sequenz und so weiter“, erläutert Weisser das hierarchische Prinzip. „Alles ist de-

finiert bis auf die Atomebene: Bindungen, chemische Modifikationen, Stereozentren.“ Aber auch die Produktentwicklung kann schrittweise verfolgt werden: Wann wurde der Antikörper aufgereinigt, chemisch modifiziert, im Tiermodell getestet oder humanisiert? So kann jeder, der an einem Projekt arbeitet, anhand einer Kennziffer jederzeit feststellen, ob bei diesem speziellen Molekül eine geplante Modifikation vielleicht schon vor einigen Jahren getestet und wieder verworfen wurde. Auf diese Weise sollen Arbeitsabläufe optimiert, doppelte Arbeiten vermieden werden.

Gut vernetzt

Hierfür kooperiert Quattro Research mit der Pistoia-Allianz, einer weltweiten Organisation aus etwa einhundert Unternehmen, sowohl kleinen Firmen wie den Entwicklern aus Martinsried bis hin zu Biotech- und Pharmariesen wie Roche, Novartis oder Merck. Be-

reits 2008 veröffentlichte Pfizer erstmals die freie HELM-Software und stellte den Quellcode der Wissenschaft zur Verfügung. Das sei ein Paradigmenwechsel gewesen, so Weisser, weg von Abkapselung und Konkurrenz hin zu Open Source und Interaktion. Seitdem arbeiten einige Firmen der Pistoia-Gruppe an der Weiterentwicklung des Programms.

Gemeinsam mit Roche hat Quattro Research beispielsweise den HELM-Antibody-Editor entwickelt. Ein Pluspunkt ist die einfache Handhabung. Der Nutzer könne beispielsweise bei einem bispezifischen Antikörper manuell die leichten Ketten zuordnen oder Disulfidbrücken schließen, erläutert Pautsch, und auf diese einfache Art die Beschreibung des Makromoleküls beeinflussen. Zudem können in Datenbanken hinterlegte Funktionseinheiten problemlos eingebaut werden. Bevor ein neuer Antikörper dann in einer Datenbank gespeichert wird, kann er anhand seiner HELM-Definition mit bereits vorhandenen verglichen wer-

den. Nur ein wirklich neuer Antikörper erhält dann eine eigene Kennung.

Und das sei erst der Anfang, ist Schirm sicher. Bei chemischen Zeichentools oder Sequenzprogrammen beispielsweise gab es vorher oftmals inkompatible Einzelstandards der Hersteller. Jetzt würden quasi alle großen Softwareanbieter auf HELM umstellen. Weisser sagt, dass selbst die amerikanische Zulassungsbehörde FDA und große Chemiedatenbanken wie Pubchem inzwischen die HELM-Notation nutzen würden.

Es tut sich also etwas – und die Entwickler aus Süddeutschland sind mittendrin.

Sigrid März

» Wer mehr über Quattro Research erfahren möchte: Auf www.laborjournal.de erschien am 19. Oktober ein Interview mit den Firmengründern Markus Weisser und Bernhard Schirm („Warum heißt Ihre Firma eigentlich Quattro Research, meine Herren?“)

Das interdisziplinäre Entwicklerteam von Quattro Research mit Cathrin Pautsch (links vorne) sowie den Geschäftsführern Bernhard Schirm (dritter von links) und Markus Weisser (fünfter von links).

Foto: Sigrid März

