



GESELLSCHAFT DEUTSCHER CHEMIKER

**Wissenschaftlicher  
Pressedienst Chemie**

43/10  
02. November 2010

**PRESSE-  
INFORMATION**

## **Jürgen Gmehling erhält Gmelin-Beilstein-Denkmünze**

### **Verleihung bei der 6. German Conference on Chemoinformatics**

Zu einer bedeutenden internationalen Tagung über Chemoinformatik und Chemieinformation hat sich die German Conference on Chemoinformatics in Goslar entwickelt. In diesem Jahr findet die von der Fachgruppe Chemie-Information-Computer (CIC) der Gesellschaft Deutscher Chemiker (GDCh) ins Leben gerufene Veranstaltung zum sechsten Mal in Goslar statt. Vom 7. bis 9. November bietet sie außer aktuellen wissenschaftlichen Vorträgen und Posterpräsentationen eine Free Software Session, eine Ausstellung, einen Marktplatz, der Ausstellern mehr als nur eine reine Standpräsentationen ermöglicht, sowie insgesamt drei Preisverleihungen. Professor Dr. Jürgen Gmehling, Universität Oldenburg, wird mit der Gmelin-Beilstein-Denkmünze der GDCh ausgezeichnet. Mit den FIZ CHEMIE Berlin-Preisen zeichnet die Fachgruppe CIC die Nachwuchswissenschaftlerinnen Dr. Simone Fulle und Karen Schomburg aus.

Die Fachgruppe CIC und ihr amerikanisches Pendant, die Division of Chemical Information der American Chemical Society, haben gemeinsam für Lehrmaterial zur Chemieinformation eine internationale Plattform mit integriertem Bearbeitungs- und Begutachtungssystem konzipiert. Das interaktive System XCITR, eXplore Chemical Information Teaching Resources ([www.xcitr.org](http://www.xcitr.org)), soll Grundlage für internationale Bildungsk Kooperationen in der Chemieinformation werden und wird in Goslar an einem Ausstellungsstand und in einem Vortrag vorgestellt.

Gesprochen wird in Goslar auch über das MoSGrid-Projekt ([www.mosgrid.de](http://www.mosgrid.de)), ein im Rahmen der D-Grid-Initiative der Bundesrepublik

GDCh-Öffentlichkeitsarbeit  
Postfach 90 04 40  
D-60444 Frankfurt am Main  
Tel.: 069/7917-493  
Fax: 069/7917-1493  
E-Mail: [pr@gdch.de](mailto:pr@gdch.de)

Diesen Text können Sie im  
Internet abrufen unter  
<http://www.gdch.de>

Deutschland gefördertes Entwicklungsvorhaben, in dem Experten aus dem akademischen Bereich zusammen mit industriellen Partnern den Aufbau und die Bereitstellung von Grid-Diensten zur Durchführung von molekularen Simulationen erarbeiten. MoSGrid soll die D-Grid-Infrastruktur für das Hochleistungsrechnen im Bereich Molekülsimulationen nutzbar machen, inklusive der Ergänzung der Ergebnisse mit Metadaten und deren Bereitstellung für Data Mining und Wissensgenerierung. Aufbauend auf den grundlegenden Techniken und Werkzeugen der D-Grid-Initiative, die bereits heute einen einfachen Zugang zu verteilten Rechenressourcen ermöglicht, wird MoSGrid die speziellen Anforderungen der chemisch orientierten Wissenschaftler in die D-Grid-Infrastruktur integrieren.

Die Gmelin-Beilstein-Denkmünze wird von der GDCh seit 1954 an Wissenschaftler verliehen, die sich besondere Verdienste um die Geschichte der Chemie, die chemische Literatur oder die Chemieinformation erworben haben. Jürgen Gmehling erhält die Silbermedaille, die mit einem Geldpreis von 7.500 Euro verbunden ist, für seine bahnbrechenden Arbeiten auf dem Gebiet der Stoffdatenbanken und zur Stoffdatenvorhersage für die chemische Industrie und Verfahrenstechnik. Seine Methoden und die Ergebnisse seiner Arbeiten werden weltweit sowohl in der akademischen Forschung als auch in der industriellen Praxis intensiv genutzt. Gmehling wurde 1946 in Duisburg geboren, ließ sich zunächst zum Chemielaboranten an der Duisburger Kupferhütte ausbilden, studierte dann in Essen Chemieingenieurwesen und schließlich Chemie an den Universitäten Dortmund und Clausthal. Bevor er sich 1982 habilitierte, verbrachte er u.a. auch ein Forschungsjahr in Berkeley (USA).

Simone Fulle, 1979 in Wiesbaden geboren, studierte Bioinformatik an der Universität Frankfurt. 2006 erwarb sie das Diplom; es folgte ein vierjähriges Promotionsstudium mit Forschungsaufenthalten an der Yale Universität und an der Arizona State Universität (beide USA). Der Titel ihrer prämierten Doktorarbeit lautet: "Constraint counting on RNA and ribosomal structures: Linking flexibility and function". Fulle befasst sich also mit RNA-strukturbiologischen Fragestellungen und hat eine grundlegende Methode zur Vorhersage der Flexibilität von RNA-Strukturen entwickelt. Fulle ist derzeit Postdoktorandin an der Universität Düsseldorf.

Karen Schomburg, 1984 in Braunschweig geboren, studierte Biochemie

in Bochum, wo sie 2007 den Bachelor-Abschluss erreichte. Ihr Masterstudium legte sie am Zentrum für Bioinformatik der Universität Hamburg ab, wo sie derzeit promoviert. Der Titel ihrer prämierten Masterarbeit lautet: "Visualization of molecular subgraph patterns using the example of SMARTS expressions". Schomburg hat eine Software entwickelt, die Zeichenketten der Chemie-Computersprache SMARTS in leicht lesbare Strukturgraphiken umwandelt.

Die Gesellschaft Deutscher Chemiker (GDCh) gehört mit etwa 30.000 Mitgliedern zu den größten chemiewissenschaftlichen Gesellschaften weltweit. Sie hat 27 Fachgruppen und Sektionen, darunter die Fachgruppe Chemie-Information-Computer mit rund 500 Mitgliedern. Die Fachgruppe wurde 1982 gegründet, weil auch in der Chemie die computergestützte Verwaltung, Archivierung, Analyse, Abfrage und Generierung von Information immer wichtiger wurde. Die Fachgruppe sieht ihre Hauptaufgabe darin, an der Information und Dokumentation sowie an Computeranwendungen in der Chemie interessierte in- und ausländische Wissenschaftler zusammenzubringen, um durch regen Gedanken- und Erfahrungsaustausch neueste Kenntnisse auf diesem Wissensgebiet zu vermitteln und fortzuentwickeln.