



GESELLSCHAFT DEUTSCHER CHEMIKER

**Wissenschaftlicher  
Pressedienst Chemie**

43/11  
17. Oktober 2011

**PRESSE-  
INFORMATION**

## **Chemoinformatics-Conference feiert ihr 25-Jähriges**

**Auch in diesem Jahr lädt die Fachgruppe Chemie-Information-Computer (CIC) der Gesellschaft Deutscher Chemiker (GDCh) zu ihrer internationalen Tagung über Chemoinformatik und Chemieinformation ein. Vom 6. bis 8. November 2011 findet die 7th German Conference on Chemoinformatics (GCC 2011) in Goslar statt. Die internationale Tagung ging vor sieben Jahren aus dem CIC-Workshop hervor, der 2011, im internationalen Jahr der Chemie, seinen 25-jährigen Geburtstag feiert. Diesem Anlass sind das wissenschaftliche Programm und das Rahmenprogramm der Konferenz gewidmet.**

Die Eröffnungsveranstaltung findet zum feierlichen Anlass im Bergbaumuseum „Rammelsberg“ in Goslar statt, welches zum UNESCO Weltkulturerbe zählt. Professor Dr. Johann Gasteiger, der das Arbeitsgebiet der Chemoinformatik in Deutschland und auch international maßgeblich prägte und zu den Initiatoren des CIC-Workshops gehört, wird die vergangenen 25 Jahre der Fachgruppe und des Workshops bilanzieren, über Erfolge berichten und zukünftige Ziele beleuchten. Auch Dr. Herbert Köppen, ehemaliger Leiter der Computational Chemistry Gruppe bei Boehringer Ingelheim wird sich in seinem Vortrag thematisch mit dem Jubiläum auseinandersetzen. Seit etwa 25 Jahren wird die Molekulare Modellierung als Werkzeug angewendet, um aus einer großen Zahl von Substanzen die biologisch Wirksame zu ermitteln. War zunächst die Erwartung der chemischen Mediziner höher als der Stand der Computertechnik, ist das computergestützte Modellieren chemischer Moleküle heutzutage unerlässlich bei der Entwicklung neuer pharmazeutischer Wirkstoffe. Köppen wird vor allem die Erfolge und auch Misserfolge der Computerchemie aus Industriesicht beleuchten. Als finales Highlight der Feierlichkeiten endet die Konferenz am Dienstagabend mit

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

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

einem weiteren Abendvortrag. Der Name des Vortragenden wird von der Fachgruppe bis zum Schluss geheim gehalten – nur soviel: er kommt vom MIT.

Das wissenschaftliche Programm bietet aktuelle Plenarvorträge, Vorträge und Poster internationaler Referenten aus Industrie und Wissenschaft. Ein Schwerpunkt der Tagung ist das Gebiet „Computergestütztes Wirkstoffdesign“, das gleich mit zwei Schwerpunktsessions beleuchtet wird: „*Cheminformatik und Drug Discovery*“ und „*Molecular Modelling*“. Mit Hilfe chemoinformatischer Analysen und Verfahren der Molekülmodellierung werden in der Arzneimittelentwicklung bei der Auswahl potentieller Molekülkandidaten neben der Bindungskinetik auch physiko-chemische Eigenschaften wie Löslichkeit oder biologische wie Bioverfügbarkeit oder Toxizität ermittelt. Immer größere Bedeutung bekommt der Einsatz von Computern in den Materialwissenschaften und der Nanotechnologie. Diesem Trend widmet sich eine weitere Session („*Computational Material Sciences and Nanotechnology*“). Oberflächenbeschichtungen gehören zu den bekanntesten Anwendungen der Nanotechnologie. Trotzdem gibt es noch viele weitere Effekte, die mit Hilfe des Computers vorhergesagt und für Anwendungen optimiert werden können. Der letzte Themenschwerpunkt befasst sich mit der Chemieinformation („*Chemical Information, Patents, and Databases*“). Neben aktuellen Entwicklungen bei öffentlichen Struktur- und Patentdatenbanken widmet sich dieses Gebiet auch dem sehr neuen Feld von Chemieanwendungen auf Mobile Devices.

Im Vorfeld der Konferenz wird am Nachmittag des 6. November eine Free-Software-Session stattfinden, in der die OpenSourceProjekte KNIME, ParaDockS, DebiChem und TRAVIS vorgestellt werden. Parallel zur Free-Software-Session werden drei Pre-Konferenz-Workshops von den Firmen Xemistry, Chemical Computing Group und Tripos Certara angeboten.

Die Fachgruppe CIC zeichnet auch in diesem Jahr zwei Nachwuchswissenschaftler mit den FIZ CHEMIE Berlin-Preisen aus. Der Preis wird jeweils für eine hervorragende Dissertation und Diplomarbeit vergeben, deren Themen eines der in der CIC vertretenen wissenschaftlichen Fachgebiete berühren und eine besondere Leistung für die Weiterentwicklung des Fachgebietes darstellen. Beide Preisträger werden ihre Arbeiten vorstellen.

Dr. Volker Dirk Hähnke, 1981 in Frankfurt am Main geboren, studierte Bioinformatik an der Universität Frankfurt. 2007 erwarb er sein Diplom am Institut für Organische Chemie und Chemische Biologie der Universität Frankfurt und fertigte dort anschließend seine Doktorarbeit an, die er an der ETH Zürich finalisierte. Der Titel seiner prämierten Arbeit lautet: „Text-Based Similarity Searching for Hit- and Lead-Candidate Identification“. Hähnke entwickelte eine PhAST (Pharmacophore Alignment Search Tool) genannte Methode, die es erstmalig ermöglicht, Anwendungen der bioinformativen Sequenzanalyse für die Suche bioaktiver Moleküle anzuwenden. Zurzeit ist Hähnke Postdoktorand am National Institute of Health, Bethesda, USA.

Daniel Moser, 1985 in Stuttgart geboren, studierte Bioinformatik an der Universität Frankfurt und fertigte seine Arbeit im Institut für Pharmazeutische Chemie an, wo er derzeit promoviert. Der Titel seiner ausgezeichneten Diplomarbeit lautet: „Automatische Extraktion von 3-D Pharmacophoren“. Moser entwickelte ein rechnergestütztes Verfahren, das das Auffinden dualer Liganden in großen Substanzbibliotheken erlaubt und überprüfte die Softwareimplementierung experimentell.

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 (CIC) mit rund 500 Mitgliedern. Die Fachgruppe wurde 1982 gegründet, weil auch in der Chemie die computergestützte Verwaltung, Archivierung, Analyse, Abfrage und Generierung von Informationen immer wichtiger wurde. Sie 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 Erkenntnisse auf diesem Wissensgebiet zu vermitteln und fortzuentwickeln.