



GESELLSCHAFT DEUTSCHER CHEMIKER

**Wissenschaftlicher  
Pressedienst Chemie**

53/13  
1. November 2013

**PRESSE-  
INFORMATION**

## **Computer, Chemie und der Nobelpreis**

### **Chemoinformatiker treffen sich in Fulda**

**Die Fachgruppe „Chemie – Information – Computer“ der Gesellschaft Deutscher Chemiker (GDCh) veranstaltet vom 10. bis 12. November die 9th German Conference on Chemoinformatics in Fulda. Schwerpunkte des Programms sind die molekulare Modellierung und das Design pharmazeutischer Wirkstoffe sowie Anwendungen für die Materialwissenschaften. Ein weiterer Fokus sind Kraftfeld-Methoden, für deren ursprüngliche Entwicklung drei US-amerikanische Chemoinformatiker im Oktober den Chemie-Nobelpreis 2013 zuerkannt bekamen.**

Nach der Eröffnung der Konferenz durch den Fachgruppenvorsitzenden Dr. Thomas Engel von der Ludwig-Maximilians-Universität München wirft PD Dr. Thomas Exner, Universität Tübingen, die Frage auf: Können quantenchemische Signal-Verschiebungen in Kernmagnetresonanz-(NMR)-Spektren als Kriterium zur Entwicklung von Kraftfeld-Modellen genutzt werden? Der Vortragende geht zunächst auf die Hindernisse und notwendigen Voraussetzungen bei der Berechnung von NMR-Spektren ein. Sind diese bekannt und berücksichtigt, so können entsprechende Simulationen anschließend genutzt werden, um neue, verbesserte Kraftfeld-Modelle zu validieren, wie Exner in Fulda zeigt.

Mit den Herausforderungen, die moderne elektronische Bauteile auf Basis flexibler organischer Moleküle an die Computersimulation stellen, beschäftigt sich der Vortrag von Professor Dr. Tim Clark, Universität Erlangen-Nürnberg. Im Zuge der Berechnungen solcher Bauteile muss nicht nur die Konformation, also die räumliche Anordnung der Moleküle,

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>

richtig vorhergesagt werden, sondern es sind auch verlässliche Beschreibungen der elektronischen Verhältnisse im System notwendig. Clark zeigt, wie moderne Kraftfeld-Methoden zur Lösung dieser Hausforderungen eingesetzt werden können.

Traditionell befasst sich der Abendvortrag am ersten Konferenztag bei näherer Betrachtung nur am Rande mit Computerchemie. Angetrieben von dem Problem, dass ausländische Studenten den in Deutsch gehaltenen Vorlesungen am Karlsruher Institut für Technologie (KIT) meist nicht folgen können, hat das Team um Dr. Sebastian Stücker vom Institut für Anthropomatik(KIT) einen Simultanübersetzer kreiert, der automatische Spracherkennung und maschinelle Übersetzung kombiniert. Das System nimmt die Vorlesung auf und sendet die Aufnahme direkt in eine cloud-basierte IT-Infrastruktur. Dort erfolgt die Übersetzung; das Ergebnis wird dann in Form von Echtzeit-Untertiteln auf einer Webseite angezeigt, auf die die Studenten mit ihren Mobilgeräten zugreifen können.

Daneben stehen viele weitere Themen aus der Chemie-Informatik in Fulda auf dem Programm. Zum Beispiel informiert Stephen Heller vom National Institute of Standards and Technology (NIST), Gaithersburg/USA, über den Fortschritt des InChI-Projekts, des International Chemical Identifier, der zwischen 2000 und 2004 von der International Union of Pure and Applied Chemistry (IUPAC) und dem NIST entwickelt wurde. InChI ist eine standardisierte Zeichenfolge, die alle relevanten Informationen eines chemischen Moleküls, wie Konnektivität (die Verknüpfung der Atome miteinander), Tautomerie (ob sich das Molekül durch schnelle Umlagerung in seiner Struktur ändern kann), Isotopie (aus welchen Isotopen der Elemente das Molekül aufgebaut ist), Stereochemie (die räumliche Anordnung der Atome zueinander) und Formalladung beinhaltet. Die InChI-Zeichenfolge ermöglicht es so, elektronische Datenbanken leichter zu durchsuchen.

Weitere Informationen zur Veranstaltung finden sich im Internet unter [www.gdch.de/gcc2013](http://www.gdch.de/gcc2013).

Die Gesellschaft Deutscher Chemiker (GDCh) gehört mit rund 31.000 Mitgliedern zu den größten chemiewissenschaftlichen Gesellschaften weltweit. Sie hat 27 Fachgruppen und Sektionen, darunter die Fachgruppe Chemie-Information-Computer (CIC) mit über 450 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.