



GESELLSCHAFT DEUTSCHER CHEMIKER

**Wissenschaftlicher  
Pressedienst Chemie**

52/15  
27. Oktober 2015

**PRESSE-  
INFORMATION**

## **Kriminalfälle lösen mit Chemie und Computer**

### **German Conference on Chemoinformatics in Fulda**

Die Fachgruppe „Chemie – Information – Computer“ (CIC) der Gesellschaft Deutscher Chemiker (GDCh) veranstaltet vom 8. bis 10. November die „11th German Conference on Chemoinformatics“ in Fulda. Die Tagung zeigt die vielseitigen Einsatzfelder der Chemo- und Bioinformatik im Zeitalter moderner Informationstechnologien. Die Computeranwendungen in der Chemie, der Pharmazie, der Biologie und den Materialwissenschaften reichen von der Entwicklung von Arzneistoffen, der Modellierung von biochemischen Strukturen bis zur Erforschung von Computermodellen, die Tierversuche ersetzen können. Zudem verleiht die Fachgruppe im Rahmen der Tagung die CIC-Förderpreise für Computational Chemistry an Achim Sandmann, Manuel Ruff und Patrick Jascha Kibies.

Vor Eröffnung der Tagung haben die Teilnehmer Gelegenheit, in Workshops neue Software kennenzulernen. Die Tagung selbst befasst sich schwerpunktmäßig mit biochemischen Fragestellungen sowie mit Wirkstoffentwicklung. In den wissenschaftlichen Vorträgen werden aktuelle Themen behandelt, die mit der Erforschung von Alzheimer und anderen Krankheiten in Bezug stehen.

Zum Abschluss des ersten Konferenztags, einem Sonntagabend, haben die Organisatoren für „Tatort“-Ersatz gesorgt: Die Kriminaltechnikerin Stefanie Pleik, Bereich „Forschung und Entwicklung“ des Bundeskriminalamts Wiesbaden, berichtet von den erhöhten Anforderungen, die die wachsende Kriminalität an die Polizeiarbeit stellt; insbesondere um immer gerissener werdenden Kriminellen mit hochmodernen forensischen Methoden der Kriminaltechnik begegnen zu

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>

können. Hierbei kommt auch der Chemie eine entscheidende Rolle zu. Denn sie hilft, neue Methoden in Analytik und Modellierung zu entwickeln und zu verfeinern. Pleik stellt einige aktuelle Forschungsprojekte vor, die zukünftig in der Forensik zum Einsatz kommen könnten.

In der Erforschung von Krankheiten leisten neue digitale Methoden einen wichtigen Beitrag. Achim Sandmann, Friedrich-Alexander-Universität Erlangen-Nürnberg, untersuchte in seiner Masterarbeit mittels Moleküldynamik-Simulationen im Mikrosekundenbereich die DNA-Bindestelle des in Krebszellen häufig mutierten Tumor-Suppressor-Proteins p53. Seine Arbeiten werden mit dem CIC-Förderpreis 2014 für Computational Chemistry gewürdigt. Sandmann stellt im Anschluss an die Preisverleihungen Details seiner Forschung in einem Vortrag vor.

Auch Manuel Ruff, der sein Studium an der Universität Trier abgeschlossen hat, erhält 2015 einen CIC-Förderpreis für seine Masterarbeit, in der er eine Methode aus dem Bereich der künstlichen Intelligenz mit quantenmechanischen Berechnungen kombiniert hat, um Wechselwirkungen zwischen Halogenen und der Aminosäure Methionin zu bewerten. Ein weiterer Preisträger ist Patrick Jascha Kibies mit seiner Masterarbeit an der Technischen Universität Dortmund zum Thema „Effiziente integralgleichungsbasierte Konformationsanalyse in Lösung“.

Weitere Informationen zur Veranstaltung finden sich im Internet unter [www.gdch.de/gcc2015](http://www.gdch.de/gcc2015).

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



