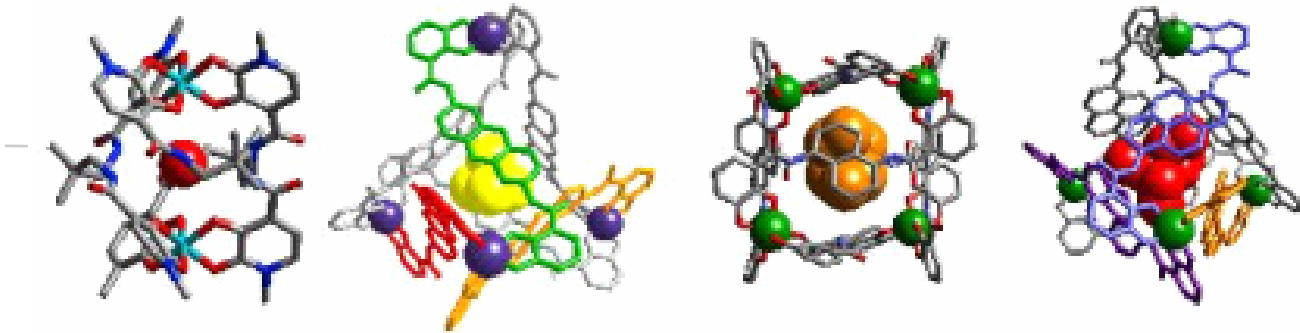




Prof. V. Helms  
Universität des Saarlandes  
Lehrstuhl für Bioinformatik  
Naturwissenschaftlich-  
Technische Fakultät III

13.1.05



**Thema für Diplom- oder Masterarbeit zu vergeben:**

### **Modellierung von Host:Guest Wechselwirkungen**

In Zusammenarbeit mit einer experimentellen Arbeitsgruppe des Korean Institute of Science and Technology Europe in Saarbrücken sollen die Lösungs- und Bindungseigenschaften kleiner aromatischer Verbindungen mittels molekularer Simulationen und Molecular Modelling (Docking) untersucht werden. Das Ziel ist - wie im Bild oben angedeutet - das rechnergestützte Design von optimalen Wirt-Molekülen (host) für die kleinen Verbindungen (guests), die parallel experimentell getestet werden sollen. In der Arbeitsgruppe sind auf diesem Gebiet umfangreiches Knowhow und Vorarbeiten vorhanden (siehe z.B. J.Am.Chem.Soc. 120, 2710-2713 (1998) und J.Phys.Chem. B, 108, 5806 (2004)).

Dieses Projekt eignet sich sowohl für Bioinformatiker als auch für theoretisch interessierte Chemiker/Physiker. Im Verlauf des Projekts werden Sie mit einer Reihe von modernen Methoden vertraut gemacht, die Sie später z.B. in der materialwissenschaftlichen Industrie anwenden können.

Weitere Informationen erhalten Sie bei

Prof. Volkhard Helms (Tel. 0681 302-64165 oder e-mail an:

volkhard.helms@bioinformatik.uni-saarland.de)