



## FIZ CHEMIE Berlin-Preis

### Ausschreibung und Teilnahmebedingungen

1. Der FIZ CHEMIE Berlin-Preis wird seit 2001 einmal jährlich vergeben. Ausgezeichnet werden je eine Dissertation und eine Diplomarbeit. Die Themen der Arbeiten müssen eines der in der GDCh-Fachgruppe Chemie-Information-Computer (CIC) vertretenen wissenschaftlichen Fachgebiete berühren und eine besondere Leistung für die Weiterentwicklung des Fachgebietes darstellen.
2. Der FIZ CHEMIE Berlin-Preis verbindet sich mit einem Preisgeld von 500 Euro für die ausgezeichnete Doktorarbeit und 250 Euro für die prämierte Diplomarbeit sowie einer Urkunde, aus der die Verdienste des Preisträgers hervorgehen. Die Preisverleihung erfolgt auf der „German Conference on Chemoinformatics“ der Fachgruppe CIC der GDCh oder einer vergleichbaren GDCh-Veranstaltung, bei der auch die preisgekrönte Arbeit in Form eines Vortrages oder Posters vorgestellt wird.
3. Vorschläge können von den Betreuern/innen der Doktoranden/innen bzw. Diplomanden/innen eingereicht werden. Voraussetzung für die Bewerbung ist, dass die Dissertation bzw. Diplomarbeit mit sehr gut bewertet wurde. Die Promotionsprüfung bzw. der Abschluss des Studiums darf zum Zeitpunkt der Antragstellung nicht mehr als ein Jahr zurückliegen. Vorschläge müssen mit einer kurzen Begründung in elektronischer Form (als pdf oder als CD) abgegeben werden, ggfs. auch in Form von Veröffentlichungen der CIC-relevanten Ergebnisse.
4. Vorschläge können jederzeit bei der Geschäftsstelle der GDCh eingereicht werden. Bewerbungsschluss für das laufende Jahr ist jeweils der 31.7. Eine frühzeitige Einreichung ist erwünscht.
5. Die Jury besteht aus mindestens zwei vom Vorstand der Fachgruppe CIC ernannten Mitgliedern und dem Geschäftsführer des FIZ CHEMIE. Eine Mitgliedschaft des/der jeweiligen Betreuers/in der vorgeschlagenen Arbeit in der Jury ist ausgeschlossen. Über die Verleihung des Preises entscheidet der Vorstand der CIC nach Kenntnisnahme des Berichtes der Jury mit absoluter Mehrheit aller amtierenden Vorstandsmitglieder.



## Die bisherigen Preisträger und ihre ausgezeichneten Arbeiten:

**2011**

**Daniel Moser**, Frankfurt am Main, für seine Diplomarbeit "Automatische Extraktion von 3-D Pharmacophoren"

**Dr. Volker Dirk Hähnke**, Frankfurt am Main, für seine Dissertation "Text-Based Similarity Searching for Hit- and Lead-Candidate Identification"

**2010**

**Karen Schomburg**, Hamburg, für ihre Masterarbeit "Visualisaztion of molecular subgraph patterns using the example of SMARTS expressions"

**Dr. Simone Fulle**, Düsseldorf, für ihre Dissertation "Constraint counting on RNA and ribosomal structures: Linking flexibility and function"

**2009**

**Frank Tristram**, Karlsruhe, für seine Diplomarbeit "Modellierung der Hauptkettenbeweglichkeit in der rechnergestützten Medikamentenentwicklung"

**Dr. Jose Batista**, Bonn, für seine Dissertation "Analysis of Random Fragment Profiles for the Detection of Structure-Activity Relationship"

**2008**

**Andreas Jahn**, Tübingen, für seine Diplomarbeit "Incorporating Molecular Flexibility into three-dimensional Structural Kernels"

**Dr. Oliver Korb**, Konstanz, für seine Dissertation "Efficient Ant Colony Optimization Algorithms for Structure- and Ligand-Based Drug Design"

**2007**

**Dr. Ole Kayser**, Hamburg, für seine Diplomarbeit "Efficient Methods for the Generation of Bioactive Conformers of Small Molecules"

**Dr. Lars Schäfer**, Göttingen, für seine Dissertation "Photoactivated Processes in Condensed Phase studied by Molecular Dynamics Simulations"

**2006**

**Dr. Alexander Schug**, San Diego/USA, für seine Dissertation "Free-Energy Simulations using Stochastic Optimization Methods for Protein Structure Prediction"

**Birte Seebeck**, Hamburg, für ihre Diplomarbeit „Modellierung von Metallwechselwirkungsgeometrien für das Protein-Ligand Docking Problem“

**2005**

**Dr. Andreas Fuchs**, Kiel, für seine Dissertation „Design und Synthese von Liganden für das Lektin FimH“

**Michael Meissner**, Frankfurt am Main, für seine Diplomarbeit „Ein metaoptimierender Partikelschwarm-Algorithmus zum Training künstlicher neuronaler Netze“



## Die bisherigen Preisträger und ihre ausgezeichneten Arbeiten:

**2004**

**Dr. Edgar Luttmann**, Paderborn, für seine Dissertation „Molecular-Modelling Untersuchungen auf dem Weg zum Verständnis der Alzheimer'schen Krankheit“

**2003**

**Dr. Frank Oellien**, Schwabenheim, für seine Dissertation „Algorithmen und Applikationen zur interaktiven Visualisierung und Analyse chemiespezifischer Datensätze“

**Gabriele Vierhuff**, Bremen, für ihre Diplomarbeit „Konzeption und Design eines Systems zur Anwendung von Struktur-Wirkungs-Beziehungen auf die Risikoanalyse von Umweltchemikalien“

**2002**

**Dr.-Ing. Matthias Keil**, Darmstadt, für seine Dissertation „Modellierung und Vorhersage von Strukturen biomolekularer Assoziante auf der Basis von statistischen Datenbankenanalysen“

**Frauke Meyer**, Heidelberg, für ihre Diplomarbeit „Calculation of Binding Free Energies including Protein Flexibility“

**2001**

**Dr. Andreas Bohne-Lang**, Heidelberg, für seine Dissertation „Ein wissensbasiertes System zur schnellen Erzeugung von 3D-Strukturen relevanter N-Glykane sowie ihrer mimikrierenden Glykoclusterstrukturen“

## Bewerbungen an die GDCh-Geschäftsstelle:

Gesellschaft Deutscher Chemiker  
Dipl.-Ing. Renate Kießling  
Varrentrappstr. 40-42  
D-60486 Frankfurt  
Telefon: (069) 7917-580  
Fax: (069) 7917-656  
E-Mail: r.kiessling@gdch.de