

# Incorporating Molecular Flexibility into three-dimensional Structural Kernels

Die Erweiterung des Optimal Assignment Kernels zu einem dreidimensionalen Molekülähnlichkeitsmaß berücksichtigt bislang nicht die strukturelle Flexibilität. Dies ist ein gravierender Nachteil, da es ein externes Konformationssampling unumgänglich macht und die Wahrscheinlichkeit, dass die besten Konformationen nicht entdeckt werden, sehr groß ist.

Im Rahmen dieser Arbeit sollen Methoden entwickelt werden, die in der Lage sind, die Flexibilität direkt in die Ähnlichkeitsberechnung zu integrieren und so das Konformationssampling zu umgehen.

Hierzu sollen zwei verschiedene Ansätze untersucht werden. Zum einen die Integration von Flexibilitätsinformationen in die Atome, zum anderen eine fragmentbasierte 3D-Überlagerung.

Die so erhaltenen Ähnlichkeitsmaße sollen auf ihre Eignung als Kernels zur QSAR/QSPR Modellierung untersucht werden.

## Voraussetzungen:

Sehr gute Java und Chemoinformatik Kenntnisse, Erfahrung in der Verwendung und Entwicklung komplexer Softwarebibliotheken

## Kontakt

Nikolas Fechner  
Sand 1, Raum 317  
Tel. (07071) 29-77174  
nikolas.fechner@uni-tuebingen.de

