



Foto Mogk

Vortrag und Diskussion

Chemische Synthese und KI

Die Vision des universellen Syntheseautomaten

**Dr. Georg Mogk, Senior Bayer Science Fellow,
Mittwoch 11. 09. 2024, 17:00-18:30, Eintritt frei, Vortrag/ Diskussion
Zoom, später Video**

Moderne pharmazeutische oder agrochemische Wirkstoffe werden in den ersten Phasen oft am Computer designt. Um ihre Wirksamkeit und Nebenwirkungen zu erforschen, müssen die Wirkstoffe letztendlich in der Realität synthetisiert werden. Aber ist ein am Computer entwickelter Wirkstoff mit dem aktuellen Stand der Chemie auch tatsächlich synthetisierbar und falls ja, wie?

Um diese Frage zu beantworten, betrachten wir in einem Gedankenexperiment einen universellen Syntheseautomaten für chemische Wirkstoffe. Dieser soll zu einer chemischen Strukturformel den Wirkstoff herstellen.

In dem Vortrag wird auf die Mathematik hinter solch einem Automaten eingegangen. Es wird erläutert, wie diese mathematischen Ansätze schon heute die Entwicklung neuer Wirkstoffe beschleunigen und welche Fragestellungen noch offen sind.

In Kooperation mit Fachgruppe Informatik der RWTH, FZ Jülich, der Regionalgruppe der Gesellschaft für Informatik (RIA), dem Regionalen Industrieclub Informatik Aachen (Regina), der Gruppe Aachen des Deutschen Hochschulverbands.



Zugang zu
Webinar
und Video

RWTHAACHEN
UNIVERSITY