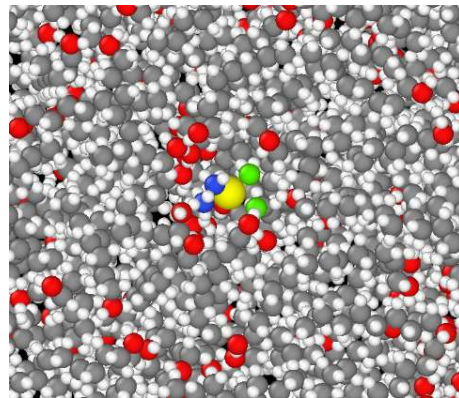


Motivation

- Organometallische Komponenten als Wirkstoffkandidaten gegen multiresistente Keime und als Chemotherapeutica
- Oktanol/Wasser-Verteilungskoeffizient als Maß für Toxizität und Verträglichkeit
- Vorhersage des Löslichkeitsverhaltens essentiell für Wirkstoffforschung



Simulation	X	Modellierung	X
Experiment	O	Konstruktion	O

Fragestellungen

- Molekulardynamische Simulationen zum Vergleich der Kraftfelder
- Strukturelle Analyse der Wirkstoff-Lösungsmittel-Wechselwirkungen
- Bestimmung von Wasser/Oktanol-Verteilungskoeffizienten

Zu diesen Fragestellungen werden Studien- und Masterarbeiten angeboten.