Entwicklung und Einsatz computergestützter Methoden zur Ermittlung struktureller Ähnlichkeiten: Analyse biologisch relevanter Ligand-Rezeptor Wechselwirkungen

Den Naturwissenschaftlichen Fakultäten der
Friedrich-Alexander-Universität Erlangen -Nürnberg

zur

Erlangung des Doktorgrades

vorgelegt von

Sandra Handschuh

aus Selb

Als Dissertation genehmigt von den

Naturwissenschaftlichen Fakultäten der Universität Erlangen-Nürnberg

Tag der mündlichen Prüfung:	10.12.1999
Vorsitzender der Promotionskommission:	Prof. Dr. W. Buggisch
Erstberichterstatter:	Prof. Dr. J. Gasteiger
Zweitberichterstatter:	Prof. Dr. P. Gmeiner
Drittberichterstatter:	Prof. Dr. G. Klebe

Meinem Doktorvater

Herrn Prof. Dr. J. Gasteiger

danke ich für die vielen anregenden Diskussionen und die vielfältige Unterstützung, ohne die die vorliegende Arbeit nicht möglich gewesen wäre.

Weiterer Dank gilt

Andreas Teckentrup, Dr. Wolf-Dietrich Ihlenfeldt, Dr. Susanne Bauerschmidt und Dr. Robert Höllering für wissenschaftliche Diskussionen und Hilfestellungen bei programmiertechnischen Fragen

Dr. Wolf-Dietrich Ihlenfeldt, Thomas Kostka, Paul Selzer, Andreas Teckentrup und Oliver Sacher für die Bereitsstellung und Aufrechterhaltung einer stabilen Hard- und Softwareumgebung

Prof. Dr. K.N. Houk für die sehr freundliche Aufnahme in seinen Arbeitskreis zur Bearbeitung eines dreimonatigen Forschungsprojekts an der University of California, Los Angeles

Dr. Bernd Goldfuß, Daniela Held und Markus Sitzmann für die Unterstützung beim Abfassen dieser Arbeit

unserer Sekretärin Angela Döbler für die Hilfe bei allen administrativen Tätigkeiten

allen anderen nicht namentlich genannten Kollegen für die sehr angenehme Arbeitsatmosphäre.

Für finanzielle Unterstützung danke ich

der Stiftung Stipendien-Fonds des Verbandes der Chemischen Industrie e.V. für ein zweijähriges Promotionsstipendium für Doktoranden

dem BMBF und der MerckKGaA im Rahmen des Verbundprojektes „Suche und Optimierung von Leitstrukturen“ (SOL).

für

Bernd,
Julia und
meine Eltern

Entwicklung und Einsatz computergestützter Methoden zur Ermittlung struktureller Ähnlichkeiten: Analyse biologisch relevanter Ligand-Rezeptor Wechselwirkungen

Dissertation

Sandra Handschuh

1999

Entwicklung und Einsatz computergestützter Methoden zur Ermittlung struktureller Ähnlichkeiten: Analyse biologisch relevanter Ligand-Rezeptor Wechselwirkungen

Den Naturwissenschaftlichen Fakultäten der
Friedrich-Alexander-Universität Erlangen -Nürnberg

zur

Erlangung des Doktorgrades

vorgelegt von

Sandra Handschuh

aus Selb

Als Dissertation genehmigt von den

Naturwissenschaftlichen Fakultäten der Universität Erlangen-Nürnberg

Tag der mündlichen Prüfung:	10.12.1999
Vorsitzender der Promotionskommission:	Prof. Dr. W. Buggisch
Erstberichterstatter:	Prof. Dr. J. Gasteiger
Zweitberichterstatter:	Prof. Dr. P. Gmeiner
Drittberichterstatter:	Prof. Dr. G. Klebe

Meinem Doktorvater

Herrn Prof. Dr. J. Gasteiger

danke ich für die vielen anregenden Diskussionen und die vielfältige Unterstützung, ohne die die vorliegende Arbeit nicht möglich gewesen wäre.

Weiterer Dank gilt

Andreas Teckentrup, Dr. Wolf-Dietrich Ihlenfeldt, Dr. Susanne Bauerschmidt und Dr. Robert Höllering für wissenschaftliche Diskussionen und Hilfestellungen bei programmiertechnischen Fragen

Dr. Wolf-Dietrich Ihlenfeldt, Thomas Kostka, Paul Selzer, Andreas Teckentrup und Oliver Sacher für die Bereitsstellung und Aufrechterhaltung einer stabilen Hard- und Softwareumgebung

Prof. Dr. K.N. Houk für die sehr freundliche Aufnahme in seinen Arbeitskreis zur Bearbeitung eines dreimonatigen Forschungsprojekts an der University of California, Los Angeles

Dr. Bernd Goldfuß, Daniela Held und Markus Sitzmann für die Unterstützung beim Abfassen dieser Arbeit

unserer Sekretärin Angela Döbler für die Hilfe bei allen administrativen Tätigkeiten

allen anderen nicht namentlich genannten Kollegen für die sehr angenehme Arbeitsatmosphäre.

Für finanzielle Unterstützung danke ich

der Stiftung Stipendien-Fonds des Verbandes der Chemischen Industrie e.V. für ein zweijähriges Promotionsstipendium für Doktoranden

dem BMBF und der MerckKGaA im Rahmen des Verbundprojektes „Suche und Optimierung von Leitstrukturen“ (SOL).

für

Bernd,
Julia und
meine Eltern

Entwicklung und Einsatz computergestützter Methoden zur Ermittlung struktureller Ähnlichkeiten: Analyse biologisch relevanter Ligand-Rezeptor Wechselwirkungen

Dissertation

Sandra Handschuh

1999