

Arbeitstitel: Chemoinformatische Vorhersage der photophysikalischen Datenbank substituierter 1,3-Thiazole

Betreuer: Prof. Dr. Robert Geitner; M. Sc. Maik Seemann

Fachgebiete: Physikalische Chemie/Katalyse

Die in einer vorangegangenen Masterarbeit erstellte Datenbank zu photophysikalischen Eigenschaften substituierter 1,3-Thiazole bietet eine Grundlage für detaillierte statistische und chemoinformatische Analysen. Erste Untersuchungen offenbarten wichtige Trends und Struktur-Eigenschafts-Beziehungen, vor allem bezüglich Fluoreszenzmaxima, Absorptionsverhalten und Stokes-Shifts.

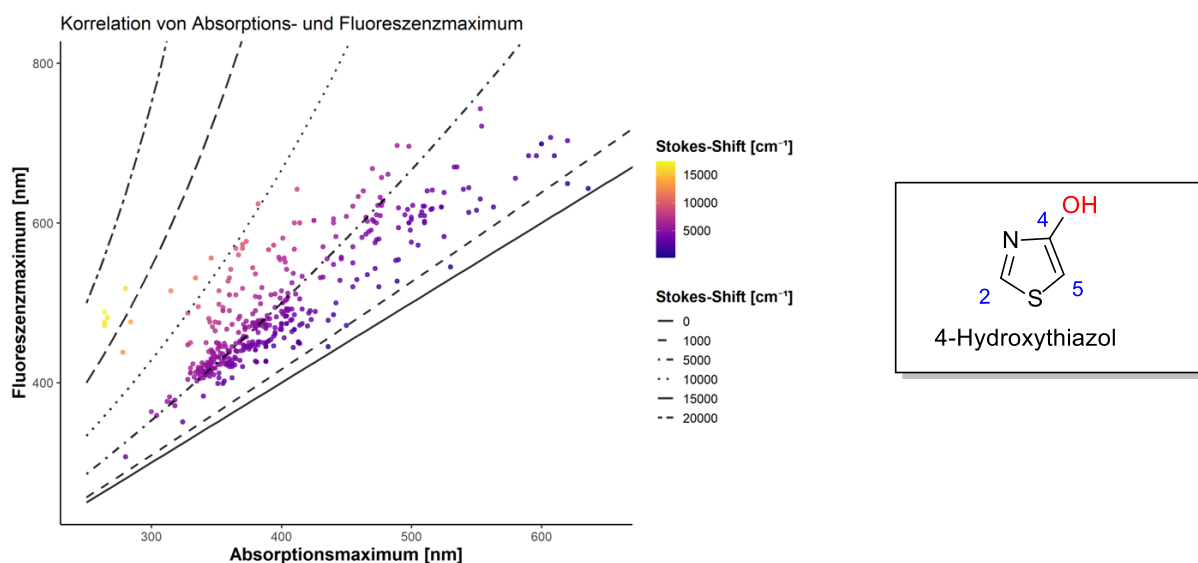


Abbildung 1: Streudiagramm zur Korrelation von Absorptions- und Fluoreszenzmaxima.

Der derzeitige Datensatz weist Lücken auf. Insbesondere fehlen Daten zu zahlreichen bereits synthetisierten, jedoch noch uncharakterisierten Thiazolderivaten. Eine systematische Verknüpfung der eigenen Datenbank mit etablierten, umfangreicheren Datenbanken, wie beispielsweise Deep4Chem, steht bislang noch aus.

Das Projekt verfolgt die gezielte Erweiterung der bestehenden Datenbank durch Integration neuer experimenteller Daten sowie die Verknüpfung mit dem Deep4Chem-Datensatz. Folgende Schritte sind dabei vorgesehen:

1. Systematische Erfassung und Vermessung der photophysikalischen Eigenschaften weiterer Thiazolderivate, insbesondere bisher unvermessener Verbindungen.
2. Integration der eigenen Datensammlung in den bestehenden Deep4Chem-Datensatz, sowie von weiteren publizierten Thiazolen um die Vorhersagekraft bestehender Modelle zu steigern.

Ein zentraler Bestandteil des Projekts ist die Nutzung von Machine-Learning-Ansätzen zur Analyse der erweiterten Datenbank. Ziel dabei ist die Entwicklung präziser Vorhersagemodelle, die es ermöglichen, photophysikalische Eigenschaften substituierter Thiazole vorherzusagen.