



GESELLSCHAFT DEUTSCHER CHEMIKER  
ORTSVERBAND SIEGEN

## **Ankündigung**

Am Dienstag, **8. Oktober 2019**, spricht um **16:30 Uhr**  
im Hörsaal AR-F 002, Department Chemie und Biologie

**Dr. Gerhard Hessler**  
**Sanofi-Aventis Deutschland GmbH**  
**Head of Synthetic Molecular Design Division**

über das Thema

***„From force field methods to artificial intelligence: In-silico technologies in drug discovery“***

Kaffeerunde ab 16 Uhr **im Foyer des Hörsaals AR-F 002**, organisiert  
durch das  
**JungChemikerForum**

Alle interessierten Kolleginnen und Kollegen, Mitarbeiterinnen und Mitarbeiter  
und Studierende sind zu diesem Vortrag herzlich eingeladen.  
Gäste sind herzlich willkommen.

Der Ortsverbandsvorsitzende  
PD Dr. Stephan Bäurle  
Tel. 0271 740-4025



**Dr. Gerhard Hessler**

**Head of Synthetic Molecular Design Division**

---

## **From force field methods to artificial intelligence: In-silico technologies in drug discovery**

Drug discovery requires tight collaboration between different disciplines to identify suitable development candidates. Typically, successful compound optimization is a multiobjective optimization, which requires parallel improvement of activity, selectivity and ADMET properties. In-silico technologies effectively support this process by using a range of different technologies which span physics-based approaches such as molecular dynamics simulations to artificial intelligence. Selected examples from different areas will be presented.