

Prof. Dr. sc. nat. Bernhard Adler

# **Computerchemie- eine Einführung**

2., erweiterte und überarbeitete Auflage

Mit 124 Bildern und 78 Tabellen



DEUTSCHER VERLAG FÜR GRUNDSTOFFINDUSTRIE  
LEIPZIG

# INHALTSVERZEICHNIS

1.	Darstellung und Erkennung von Molekülen und Moleküleigenschaften	11
1.1.	Probleme der Struktur-Eigenschafts-Abbildung	11
1.2.	Formen der Moleküldarstellung und Applikationen	14
1.3.	Deskriptoren	20
1.3.1.	Konnektivitätsindizes	21
1.3.2.	Kombinationsdeskriptoren	23
1.3.3.	Deskriptoren aus Ordnungszahl und Kantensequenzen	29
1.3.4.	Distanzspektren	31
1.4.	Lexikographische Anordnungen	32
1.5.	Linearnotationen und Fragmentcodes zur Recherche	37
1.5.1.	Linearnotationen	39
1.5.2.	Umfeldorientierte Fragmentcodes	45
1.6.	Synthondarstellungen	49
1.7.	Erkennen spezieller Substrukturen	50
1.7.1.	Backtrack-Algorithmus	50
1.7.2.	Ringerkennung	51
1.7.3.	Resonanzstrukturen	55
1.8.	Struktur-Eigenschafts-Relationen (SER) und Struktur-Aktivitäts-Relationen (SAR)	60
1.8.1.	Empirisch-physikalische Modelle	62
1.8.1.2.	Inkrement und Gruppeneigenschaften	67
1.8.2.	Formale SAR- bzw. SER-Abbildungen	71
1.8.2.1.	Ausgewählte Beispiele für SAR über Klassifizierungsverfahren	73
1.8.2.2.	Quantitative Struktur-Eigenschafts-Beziehungen	77
1.8.2.3.	Simulation von SAR aus $\chi$ -Werten	78
1.9.	Dreidimensionale Molekülabbildungen	80
1.10.	Ein- und Ausgabetechniken zur Molekülabbildung	87
1.11.	Standardmodule	88

2.	Verfahren der Mustererkennung	94
2.1.	Vorbehandlung der Merkmale	98
2.1.1.	Merkmalsauswahl	98
2.1.2.	Skalierung und Normierung	100
2.2.	Klassifizierungsverfahren	102
2.2.1.	Distanzverfahren	102
2.2.2.	Lernmaschine und Applikationen	107
2.2.2.1.	Prinzip der Lernmaschine	107
2.2.2.2.	Bildung repräsentativer Merkmale für Simulationen von SAR und zur Spektrenauswertung	109
2.3.	Hauptkomponentenanalyse (Displayverfahren)	111
2.4.	Clusteranalysen	115
2.4.1.	Verfahren harter Clusterung	116
2.4.2.	Fuzzy-set-Clusterung	124
3.	Datenbanken für chemische Probleme	129
3.1.	Dateiarchitekturen	132
3.2.	Spektrendateien	141
3.3.	Suchstrategien	146
3.3.1.	Strategien zur Strukturrecherche	151
3.3.2.	Strategien zur Spektrenrecherche	154
3.3.3.	Spektrenrecherche auf der Basis der Fuzzy-set-Theorie	161
4.	Rechnergestützte interpretative Strukturermittlung	166
4.1.	Logische Strukturgruppenanalyse (Vergleichsoperations- verfahren)	170
4.2.	Strukturgenerierung	173
4.2.1.	Bestimmung der Isomerenzahl	174
4.2.2.	Konstitutionsgenerierung	175
4.2.3.	Generierung von Stereoisomeren	183
4.3.	Spektrensimulationen	192
4.3.1.	Simulation von Schwingungs-, Massen- und NMR-Spektren	192
4.3.2.	Vollständige Simulation von Schwingungsspektren und Molekülparametern	195

5.	Rechnergestützte Syntheseplanung	203
5.1.	Computergerechte Darstellung von Reaktionsabläufen	205
5.2.	Bewertungskriterien für die rechnergestützte Syntheseplanung	212
5.2.1.	Strategische Bewertungskriterien	213
5.2.2.	Mechanistische Bewertungskriterien	215
5.2.2.1.	Thermodynamische Bewertung	215
5.2.2.2.	Hierarchische Ordnung des Reaktionsgenerators zur Simulation massenspektroskopische Reaktionen	219
5.2.2.3.	Heuristische Beurteilung der Reaktivität	224
5.2.2.4.	Bewertung der räumlichen Anordnung von funktionellen Gruppen	224
6.	Anhang	226
6.1.	Erläuterung von Fachausdrücken	226
6.2.	Verzeichnis der benutzten Symbole	248
	Literaturverzeichnis	251
	Sachwörterverzeichnis	272