



Spielerei verdeckt Nützliches

Computer werden in der täglichen Arbeit des Chemikers quer durch alle Fachgebiete in vielfältiger Weise eingesetzt. Neben typischen Desktop-Anwendungen wie dem Zeichnen von Strukturformeln oder der dreidimensionalen Darstellung von Molekülen spielen Datenbanken (vor allem mit Substruktursuche) wie auch quantenchemische Rechnungen eine Rolle. Alle diese Dienste und noch einige mehr sind auf der Internetseite des Computer-Chemie-Zentrums der Universität Erlangen zusammengestellt worden. Die Einstiegsseite präsentiert sich als recht lange Liste von Links zu den einzelnen Modulen.

Das erste Modul erlaubt die Darstellung der dreidimensionale Struktur von Molekülen. Es ist nicht möglich, ein Molekül sukzessive wie mit einem Molekülbaukasten zusammenzubauen, stattdessen muss man die Verknüpfung aller Atome durch einen SMILES-String angeben, den man auch mit dem Online-Molekül-Editor JME erstellen kann. Dieser Moleküleditor wird auch in anderen Diensten dieses Internet-Angebots verwendet. Er bietet deutlich weniger als gängige Molekülzeichenprogramme. So kennt er zwar Keile, um nach vorne gehende Bindungen zu kennzeichnen, aber keine gestrichelten Linien für nach hinten zeigende Substituenten. Das erschwert die Eingabe einer definierten Stereochemie. Die dreidimensionale Struktur (stabilste Konformation) des Moleküls wird dann aufgrund eines Satzes von Regeln und einer Strukturdatenbank mithilfe des CORINA-Programms geratet und graphisch (als Drahtgitter) dargestellt, wobei man die Koordinaten der Atome in unterschiedlichen Formaten zur weite-

ren Verwendung lokal abspeichern kann. Bei der Bestimmung der günstigsten Konformation leistet CORINA mehr als viele Desktop-Programme: *cis*-1,4-di-*tert*-Butylcyclohexan wird z. B. in der Twist-Konformation dargestellt. Der anomere Effekt scheint nicht berücksichtigt zu werden: 2-Chlortetrahydropyran wird mit äquatorialem Chloratom gezeichnet. Dreidimensionale Darstellungen hoher Qualität („VRML scenes“) kann man ebenfalls erhalten (Bild 1). Mit einem weiteren Link kann man Strukturformeln in niedriger Auflösung zeichnen lassen.

Für die meisten dieser Aufgaben ist lokal vorhandene Software besser geeignet. Dies ist bei Datenbankanwendungen anders: Hier macht es Sinn, den Datenbestand zentral zu pflegen. Eines der besten Angebote aus Erlangen ist daher auch eine Recherchemöglichkeit in der Chemikaliendatenbank des amerikanischen National Cancer Institute (NCI), die etwa 250 000 Verbindungen mit Informationen insbesondere zur biologischen Aktivität enthält. Substruktur-Suchen sind ebenso möglich wie das gezielte Auffinden einer Substanz nach Summenformel oder CAS-Nummer.

Über mehrere Links wird Zugang zu semiempirischen quantenchemischen Rechnungen (PM3) angeboten. Zum einen kann man Molekülorbitale von Hauptgruppenverbindungen berechnen und graphisch darstellen, was bei mir aber nicht funktioniert hat. Des weiteren ist es möglich, das elektrostatische Potential auf der Oberfläche kleiner Moleküle darzustellen (Abbildung 2) sowie ein IR-Spektrum zu simulieren. Die Größe der Moleküle ist dabei auf rund 30 Atome begrenzt, um den Server vor Überlast zu bewahren. Beide Dienste können Studierende an diese Methoden heranzuführen, sind aber wegen der Beschränkung der Molekülgröße nicht

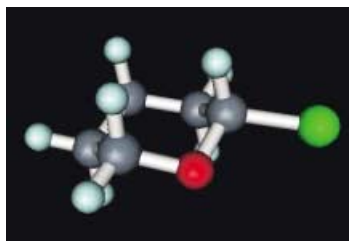


Abbildung 1. Geometrie von 2-Chlortetrahydropyran, berechnet mit CORINA.

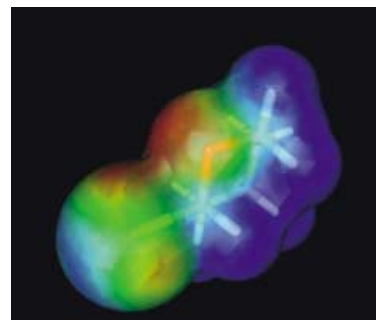


Abbildung 2. Elektrostatische Potentialoberfläche.

wirklich nützlich. Das Internet ist in dieser Form kein Ersatz für den Schreibtisch-Computer. Schon deren kombinierte Rechenleistung kann durch einen zentralen Server nicht ersetzt werden.

Außer durch numerische (quantenchemische) Rechnungen können IR-Spektren auch durch neuronale Netze vorhergesagt werden. Die Vorhersage basiert dabei auf der Erfahrung, die dem neuronalen Netz anhand von bekannten Spektren antrainiert worden ist. Zur Anzeige des Spektrums ist eine Erweiterung der Browser-Funktionalität erforderlich, z. B. durch das frei verfügbare Chime-Plugin. Obwohl Chime für Macintosh (Classic) und Windows Rechner verfügbar ist, funktioniert die Darstellung von Spektren nur unter Windows.

Die 16 gleichartig untereinander stehenden Links der Hauptseite lassen das Angebot wegen der Vielfältigkeit der angebotenen Dienste etwas unstrukturiert erscheinen. Den Autoren ist nach eigenen Angaben daran gelegen, die prinzipielle Möglichkeit solcher Dienste zu demonstrieren. Das meiste erlaubt allerdings nur Spielerei und verdeckt dabei etwas die nützlichen Angebote wie die Bestimmung der stabilsten Konformation oder die Abfragesoftware für die NCI-Datenbank.

Christoph van Wüllen
Technische Universität Berlin

Für weitere Informationen besuchen Sie:
<http://www2.chemie.uni-erlangen.de/services>
oder nehmen Sie Kontakt auf mit:
Axel.Schunk@chemie.uni-erlangen.de