

# Inhalt

## EINLEITUNG

1.	SYNTHESEPLANUNG ALS ERGEBNIS VON INTUITION, ZUFALLS- BEFUNDEN UND BEWÜBT LOGISCHER ABLEITUNG . . . . .	1
----	---	---

## TEIL A: GRUNDLAGEN

2.	ALLGEMEINES . . . . .	4
2.1.	PLANUNG ALS PROBLEMLÖSUNG . . . . .	4
	DER ANALOGIESCHLUß . . . . .	5
	DIE ZWECKRICHTUNG EINER PLANUNG . . . . .	7
	VERSUCHSPANUNG . . . . .	7
	OPTIMIERUNGSPROBLEME . . . . .	8
2.2.	MOTIVE UND KRITERIEN EINER SYNTHESEPLANUNG . . . . .	9
2.2.1.	ALLGEMEINES . . . . .	9
2.2.2.	WICHTIGE PLANUNGSZIELE . . . . .	10
	DER WIRKSTOFF . . . . .	10
	DER FARBSTOFF . . . . .	10
	DAS ZWISCHENPRODUKT UND DAS REAGENZ . . . . .	10
	DER KATALYSATOR . . . . .	10
	DER HILFSSTOFF . . . . .	11
	DER STOFF ALS MEDIUM . . . . .	11
	DER STOFF ALS CHEMISCHER ENERGIESPENDER . . . . .	11
	DER WERKSTOFF . . . . .	11
	DER STOFF ALS INFORMATION . . . . .	11
	DAS VERFAHREN ALS PLANUNGSZIEL . . . . .	12
2.3.	DIE ROLLE DES COMPUTERS . . . . .	12
3.	INFORMATION UND DOKUMENTATION . . . . .	15
3.1.	ALLGEMEINES . . . . .	15
3.2.	WIEDERGABEFORMEN VON CHEMISCHER INFORMATION . . . . .	16
3.2.1.	STRUKTURMODELL, STRUKTURFORMEL, TOPOLOGISCHE STRUKTURVERSCHLÜSSELUNG . . . . .	16
3.2.2.	DIE CHEMISCHE NOMENKLATUR . . . . .	19
3.2.3.	DIE WISWESSER LINE-NOTATION (WLN) . . . . .	19
3.2.4.	DER FRAGMENTCODE GREMAS . . . . .	21
3.2.5.	WEITERE FORMEN DER STRUKTURBESCHREIBUNG . . . . .	23
3.2.6.	THESAURI . . . . .	23
3.2.7.	BESCHREIBUNG VON VERFAHREN UND STOFFSYSTEMEN. DAS DOKUMENTATIONSSYSTEM TOSAR . . . . .	24
3.3.	DIE SUCHE NACH DER INFORMATION . . . . .	29
3.3.1.	DIE MASCHINELLE INFORMATIONSSUCHE IM STAPEL-VERFAHREN . . . . .	29
3.3.2.	MASCHINELLE INFORMATIONSSUCHE IM DIALOG . . . . .	30

4.	BESCHREIBUNG UND KLASSIFIKATION VON REAKTIONEN . . . . .	34
4.1.	ALLGEMEINES . . . . .	34
4.2.	KLASSIFIKATIONSSYSTEME . . . . .	36
4.3.	PRAKTISCHE REAKTIONENDOKUMENTATION . . . . .	44
4.3.1.	ALLGEMEINES . . . . .	44
4.3.2.	TOPOLOGISCHE REAKTIONENDOKUMENTATION . . . . .	45
4.3.3.	REAKTIONENDOKUMENTATION IM GREMAS-SYSTEM . . . . .	46
TEIL B: PLANUNGEN		
5.	DIE SYSTEMATISCHE PLANUNG VORWIEGEND EINSTUFIGER SYNTHESEN . . . . .	50
5.1.	PROBLEMARIANTEN . . . . .	50
	REAKTIONENBIBLIOTHEKEN (VERFAHRENSBIBLIOTHEKEN) . . . . .	51
	SUBSTANZBIBLIOTHEKEN . . . . .	54
	DAS SYNTHON . . . . .	54
5.2	PLANUNGSVERFAHREN . . . . .	56
5.2.1.	RECHERCHE NACH GEEIGNETEN SYNTHESEN IM DIREKTEN RETRIEVAL . . . . .	57
5.2.2.	RECHERCHE NACH GEEIGNETEN SYNTHESEN IM UMKEHR-RETRIEVAL	59
5.2.3.	SYNTHESEPLANUNG AUF RETRIEVALBASIS MIT ERWEITERTER COMPUTERVERWENDUNG . . . . .	61
5.2.4.	DEDUKTIVE PLANUNGSVERFAHREN . . . . .	61
5.3.	BEWERTUNGEN UND BERECHNUNGEN . . . . .	66
6.	PLANUNG DER SYNTHESWEGE . . . . .	69
6.1.	GRUNDSÄTZLICHES ZUR PLANUNG VON SYNTHESWEGEN . . . . .	69
6.1.1.	BILDICHE DARSTELLUNG VON SYNTHESWEGEN . . . . .	69
6.1.2.	PROBLEMARIANTEN . . . . .	70
6.1.3.	DIE SUCHE NACH DEM GÜNSTIGSTEN SYNTHESWEG . . . . .	71
6.2.	PLANUNG VON SYNTHESWEGEN MIT AN SICH BEREITS BEKANNTEN REAKTIONSSCHRITTEN . . . . .	73
6.2.1.	POLYMERSYNTHESEN MIT VIELEN SCHRITTEN IN DERSELBEN VERFAHRENSSTUFE . . . . .	73
6.2.2.	SCHRITTWEISE EXTERN KONTROLLIERTE POLYMERSYNTHESEN . . . . .	76
	SYNTHESEN VON POLYPEPTIDEN . . . . .	77
	SYNTHESEN VON POLYNUCLEOTIDEN . . . . .	81
6.2.3.	SYNTHESEN REPLIKATIONSFÄHIGER POLYMERE . . . . .	83
6.2.4.	SYNTHESEN VON POLYPEPTIDEN VIA SIE CODIERENDER NUCLEINSÄUREN . . . . .	85

6.3.	PLANUNG VON SYNTHESWEGEN IN VERBINDUNG MIT DER SCHRITTERMITTLUNG . . . . .	93
6.3.1.	ALLGEMEINES . . . . .	93
6.3.2.	SYNTHESEN VON ZIELMOLEKÜLEN HOHER KOMPLEXITÄT . . . . .	96
	BIOMINETISCHE SYNTHESEN . . . . .	96
	DIE SCHLÜSSELVERBINDUNG . . . . .	98
	DIE SCHLÜSSELREAKTION . . . . .	102
	MODELLSYNTHESEN . . . . .	105
	RELAISVERBINDUNGEN . . . . .	107
6.3.3.	PLANUNGSVERFAHREN . . . . .	107
6.3.3.1.	RECHERCHE NACH GEEIGNETEN SYNTHESWEGEN IM DIREKTEN RETRIEVAL . . . . .	108
6.3.3.2.	RECHERCHE NACH GEEIGNETEN SYNTHESWEGEN IM UMKEHRRETRIEVAL . . . . .	110
6.3.3.3.	SYNTHESEPLANUNG AUF RETRIEVALBASIS MIT ERWEITERTER COMPUTER-VERWENDUNG . . . . .	112
6.3.3.4.	DEDUKTIVE PLANUNGSVERFAHREN . . . . .	115
6.4.	ALLGEMEINE SYNTHESE-OPTIMIERUNG . . . . .	116
7.	BESONDERE PROBLEME . . . . .	118
7.1.	DIE POLARE SUBSTITUTION . . . . .	118
7.2.	ASPEKTE DER RINGBILDUNG . . . . .	119
7.3.	GEWINNUNG VON OPTISCH AKTIVEN VERBINDUNGEN . . . . .	126
8.	ERWEITERTE SYNTHESEPLANUNG . . . . .	130
8.1.	STOFFPLANUNG . . . . .	130
8.2.	PLANUNG ZU PHYSIKALISCH-TECHNISCHEN VERFAHREN . . . . .	135
8.2.1.	PHYSIKALISCHE LABORATORIUMSMETHODEN . . . . .	135
8.2.2.	CHEMISCHE VERFAHRENSTECHNIK . . . . .	135
8.3.	ANALYTIK . . . . .	137
8.3.1.	LEISTUNGEN UND ENTWICKLUNGEN . . . . .	137
8.3.2.	SYNTHESEPLANUNG ZUR LÖSUNG ANALYTISCHER PROBLEME . . . . .	141
8.3.3.	BERÜCKSICHTIGUNG DER ANALYTIK BEI DER SYNTHESEPLANUNG . . . . .	141
9.	INDUSTRIELLE SYNTHESEPLANUNG . . . . .	142
10.	PLANUNGSSKIZZEN . . . . .	149
	Motiv A: Suche nach einem neuen Syntheseverfahren . . . . .	150
	Motiv B: Suche nach einem neuen Verfahren zur Synthese eines bestimmten Stoffes bzw. Stofftyps . . . . .	150
	Motiv C: Aufklärung der Verwendungsmöglichkeiten eines Reagenzes . . . . .	151
	Motiv D: Suche nach einer neuen Verwendung für einen Grundstoff . . . . .	151
	Motiv E: Suche nach der Stoffeigenschaft . . . . .	152
	Motiv F: Synthese eines Stoffes hoher Komplexität . . . . .	152

## TEIL C: ERGÄNZUNGEN

11.	SPEZIELLE SYNTHESPLANUNGSSYSTEME MITTELS COMPUTER	154
11.1.	SYSTEM LHASA NACH COREY	154
	STRUKTUREINGABE	155
	STRUKTURERKENNUNG	155
	BERÜCKSICHTIGUNG VON SYNTHESSTRATEGIEN. REAKTIONEN-(TRANSFORM-) BIBLIOTHEK	157
	FINDUNG UND BILDUNG DER VORSTUFENMOLEKÜLE	161
	BEWERTUNGEN	161
11.2.	SYSTEM SECS NACH WIPKE	162
	EINGABE DER ZIELSTRUKTUR	162
	AUTOMATISCHE STRUKTURERKENNUNG UND -MODELLIERUNG	163
	TRANSFORM-BIBLIOTHEK	163
	DIE ERMITTLUNG VON VORSTUFEN UND SYNTHESWEGEN	164
	PLANUNG VON SYNTHESEN PHOSPHORORGANISCHER VERBINDUNGEN	166
	PLANUNG IN SYNTHESRICHTUNG	166
11.3.	SYSTEM SYNCHER NACH GELERNTER	168
11.4.	SYSTEM NACH BERSOHN	170
11.5.	SYSTEM EROS UND ASSOR NACH UGI	172
11.6.	SYSTEM MASSO NACH MOREAU	176
11.7.	SYSTEM AHMOS/SYNPLAN/SYNAB NACH WEISE	180
12.	DIE STRUKTUR- UND REAKTIONSCHEMISCHE ARGUMENTATION BEI DER SYNTHESPLANUNG	184
12. 1.	ALLGEMEINES	184
12. 2.	KONSTITUTION EINES MOLEKÜLS	185
12. 3.	KONFIGURATION EINES MOLEKÜLS	186
12. 4.	KONFORMATION EINES MOLEKÜLS	187
12. 5.	REAKTIVITÄT UND SELEKTIVITÄT	187
12. 6.	POLARE REAKTIONEN	190
12. 7.	RADIKALISCHE REAKTIONEN	191
12. 8.	PHOTOREAKTIONEN	191
12. 9.	STERISCHE EFFEKTE	192
12.10.	BERECHNUNGEN VON REAKTIONEN	192
12.11.	DIE WOODWARD-HOFFMANN-REGELN	195
12.12.	KATALYTISCHE EFFEKTE	195
12.13.	LÖSUNGSMITTELEFFEKTE	197
	ANHANG: WERKE UND PERIODICA ZUR REAKTIONENCHEMIE	198
	WERKE MIT ZUMINDEST STARKEM BEZUG AUF SYNTHESEN	199
	WEITERE SPEZIELLE REVIEW-ORGANE	209
	JAHRESBERICHTE	209
	WERKE ÜBER REAGENZIEN	210
	WERKE ÜBER VORNEHMLICH PHYSIKALISCHE METHODEN	210