

Inhaltsverzeichnis

Kapitel 1. Einführung in die Computertechnik (E. Ziegler)	1
1.1 Eigenschaften von Computern	1
1.2 Wie Computer arbeiten	3
1.3 Zentraleinheit und Hauptspeicher	5
1.4 Sonstige Computer-Hardware: Angeschlossene Geräte	7
1.4.1 Datenein-/ -ausgabe	7
1.4.2 Magnetspeicher	8
1.5 Speicherhierarchie	10
1.6 Die Software von Computern	10
1.6.1 Programmiersprachen	11
1.6.2 Das Betriebssystem	14
1.6.3 Betriebsarten von Rechnern	15
1.7 Zusätzliche Begriffe aus der Computertechnik	16
1.8 Trends in der Benutzung von Computern	19
1.8.1 „Personal computer“ oder „der Computer für jeden“	19
1.8.2 Rechnernetze	20
1.8.3 Trends in der Computer-Software	21
1.8.4 Datenbanken	22
1.9 Was Computer nicht können	22
1.10 Weiterführende Literatur	23
Kapitel 2. Computer als Hilfsmittel für die Informationsversorgung – Online-Literatur- und Struktur-Recherchen (E. Zass)	24
2.1 Einleitung	24
2.1.1 Was ist eine Online-Recherche?	25
2.1.2 Wie funktioniert eine Online-Recherche?	27
2.2 Online-Recherchen zur Lösung chemischer Informationsprobleme: Beispiele aus der Praxis	32
2.2.1 Literaturrecherchen	32
2.2.2 Datenrecherchen	50
2.2.3 Substrukturrecherchen	51
2.3 Online-Recherchen: Möglichkeiten und Grenzen	61
2.4 Ausblick	63

2.5 Anhang: Adressen	65
2.6 Literatur	66
Kapitel 3. Computer-Anwendungen in der Instrumentellen Analytik <i>(E. Ziegler)</i>	74
3.1 Historische Entwicklung	75
3.2 Verbesserung der traditionellen analytischen Methoden	76
3.3 Messen mit Computerunterstützung	77
3.4 Numerische Bearbeitung digitalisierter Meßkurven	79
3.5 Entwicklung neuer Meßtechniken	83
3.6 Computersysteme für die Analytik	89
3.7 Hilfsmittel zur Interpretation analytischer Daten	90
3.8 Auswirkungen auf die Tätigkeit des Analytikers	91
3.9 Bilanz: Computerbedingte Fortschritte	93
3.10 Weiterführende Literatur	95
Kapitel 4. Rationalisierung im Labor mit Mikroprozessor und Mikrocomputer <i>(R. W. Arndt)</i>	96
4.1 Einleitung	96
4.2 Zielsetzungen der Automation im Labor	96
4.3 Mikroprozessoren und Mikrocomputer	98
4.4 Einsatzmöglichkeiten	104
4.5 Lösungen und Alternativen	106
4.6 Evaluation und Wahl	111
4.7 Implementation und Einführung	112
4.8 Wie lernt man Automation	113
4.9 Ausblick	116
4.10 Literatur	117
Kapitel 5. Datenbanken für die Analytik <i>(G. Székely, J. T. Clerc)</i>	118
5.1 Einführung	118
5.2 Zielsetzungen	119
5.3 Der Spektren-Interpretations-Prozeß	121
5.4 Automatisierung der Spektren-Interpretation	123
5.5 Interne Organisation	124
5.6 Suchstrategien und Ähnlichkeitsmaße	126
5.7 Externe Organisation	128
5.8 Literatur	130

Kapitel 6. Chemometrie (K. Varmuza)	131
6.1 Übersicht	131
6.2 Mustererkennung/Pattern Recognition	133
6.2.1 Einleitung	133
6.2.2 Einfache Klassifikatoren	135
6.2.3 Klassifizierung bei komplizierten Clusterstrukturen	140
6.2.4 Merkmalsauswahl	144
6.2.5 Clusteranalyse	145
6.2.6 Zusammenfassung	147
6.3 Optimierung	148
6.3.1 Einleitung	148
6.3.2 Methoden	149
6.3.3 Anwendungen	152
6.4 Literatur	153

Kapitel 7. Praktische Anwendung von MO-Verfahren (P. Bischof) 154

7.1 Das „MO-Spektrometer“	154
7.2 Das Moleköl im „MO-Spektrometer“	156
7.3 Die „Messung“ der Energie	159
7.4 Methoden und Näherungen	163
7.4.1 „ab initio“	163
7.4.2 NDDO (Neglect of Diatomic Differential Overlap)	163
7.4.3 INDO (Intermediate Neglect of Differential Overlap)	164
7.4.4 CNDO (Complete Neglect of Differential Overlap)	164
7.5 Die Struktur-Energie-Beziehung; Moleküldynamik	165
7.6 Interpretation spektroskopischer Daten	167
7.7 Die Qual der Wahl	168
7.8 Aufbau einer Programmbibliothek	170
7.9 Literatur	171

**Kapitel 8. Röntgenstrukturanalyse – eine computer-abhängige Methode
(C. Krüger)** 173

8.1 Einleitung	173
8.2 Das Prinzip der Röntgenbeugung	174
8.3 Ablauf einer Röntgenstrukturanalyse	176
8.3.1 Datensammlung, Datenreduktion und Datenkorrekturen	177
8.3.2 Strukturermittlung	188
8.3.3 Verfeinerung eines Strukturmodells	193
8.3.4 Strukturbeschreibung	196
8.4 Kristallographische Datensammlungen	202
8.5 Ausblick	204
8.6 Literatur	204

Kapitel 9. Syntheseplanung (J. Gasteiger)	207
9.1 Die Problemstellung	207
9.2 Die Repräsentation von Molekülen: Dokumentation, Substruktursuche, Strukturaufklärung	214
9.3 Die Repräsentation von Reaktionen: Reaktionsvorhersage, Syntheseplanung, Synthesebaum	222
9.4 Stufe 1: Datei bekannter Reaktionen	227
9.5 Stufe 2: Formale Reaktionsschemata	231
9.6 Stufe 3: Mechanistische Bewertung von Molekülen und Reaktionen	241
9.7 Stufe 4: Mechanistische, ökonomische und strategische Bewertung von Synthesen	247
9.8 Die Praxis der Programmbenutzung	251
9.9 Ausblick	255
9.10 Literatur	256
Anhang. Verzeichnis von Fachausdrücken (E. Ziegler, E. Zass)	258
Namen- und Sachverzeichnis	275