

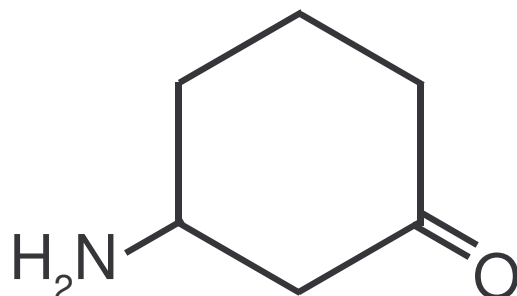
Computeranwendung in der Chemie Informatik für Chemiker(innen)

9. Darstellung chemischer Strukturen

Grundlagen

- Beschreibung der Struktur von chemischen Verbindungen nötig für EDV
- Verschiedene Ansätze möglich, z.B.
 - topologische Informationen
 - geometrische Informationen
- Unterschiedliche Anforderungen für verschiedene Anwendungen
 - Strukturberechnung
 - Datenbank mit Stoffeigenschaften

Darstellung als Strichformel



Beispiel: 3-Aminocyclohexanon

Darstellung geeignet für Menschen aber nicht für Computer

- Einige Informationen nur implizit enthalten
- Kohlenstoffatome nicht dargestellt
- Wasserstoffatome implizit
- Molekül nicht planar („chemische Intuition“)

Darstellung als 3D-Struktur

Kartesische Koordinaten

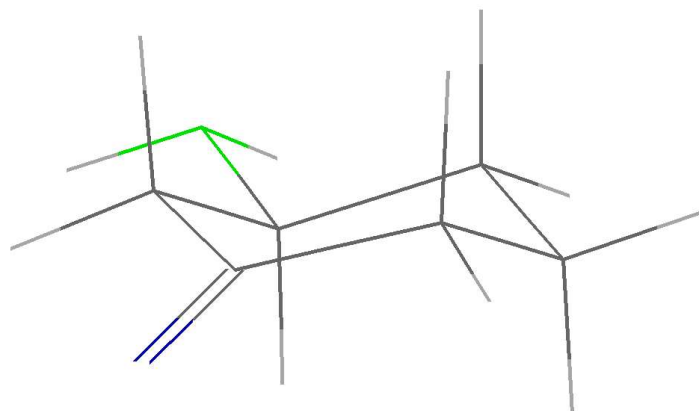
- Speicherung von x, y und z Koordinaten für jedes Atom
- Molekülstruktur festgelegt, jedoch keine Bindungsinformationen enthalten
- Verwendung z.B. für theoretische Methoden (Strukturberechnung)

Kartesische Koordinaten – Beispiel

C	-1,29496	0,48358	0,08518
O	-2,25012	1,14220	-0,29545
C	0,08533	1,09660	0,32118
C	-1,38563	-1,01524	0,37499
C	1,22773	0,28640	-0,32990
H	0,06655	2,14673	-0,04272
H	0,28020	1,11973	1,42076
C	1,13862	-1,19311	0,08086
N	2,51326	0,84952	0,09616
C	-0,22631	-1,80072	-0,27658
H	1,95384	-1,76753	-0,41709
H	1,32450	-1,26266	1,17817
H	-1,33113	-1,14260	1,48353
H	-2,38078	-1,37742	0,04286
H	-0,27012	-2,86652	0,03902
H	-0,35856	-1,79581	-1,38341
H	3,28610	0,36743	-0,39012
H	2,57263	1,84224	-0,18109
H	1,07301	0,33191	-1,44383

Koordinaten in
Ångström
(1 Å = 10⁻¹⁰ m)

Grafische Darstellung



Strich- bzw. Drahtmodell (engl. wire model)

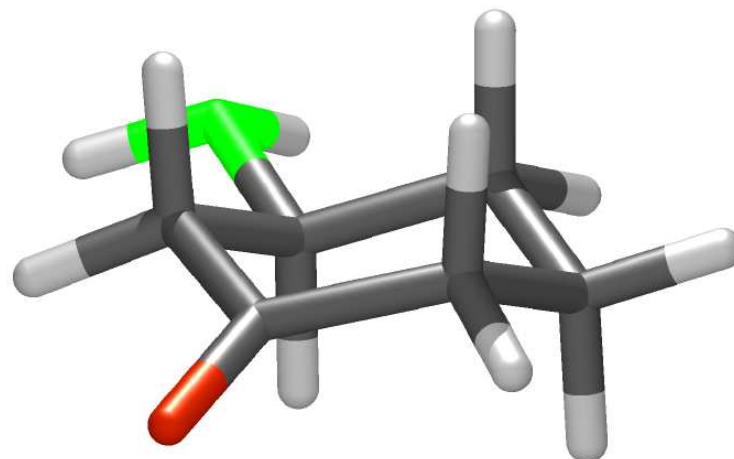
Vorteile:

- Darstellung schnell
- Verschiedene Bindungstypen darstellbar

Nachteil:

- Räumliche Darstellung nicht sehr gut

Grafische Darstellung



Stabmodell (engl. stick model)

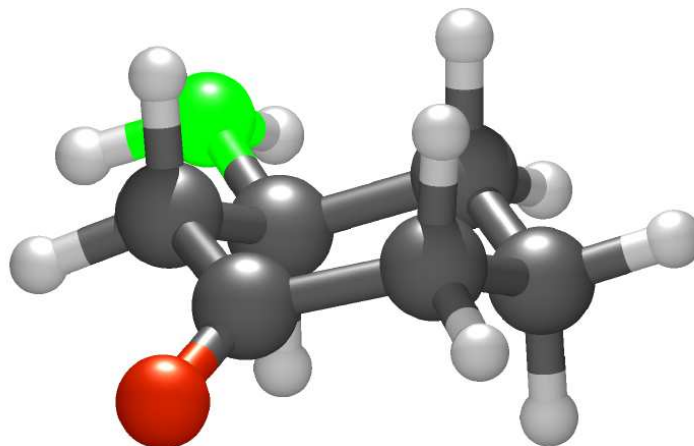
Vorteil:

- Guter räumlicher Eindruck

Nachteil:

- Darstellung rechenaufwändiger, daher langsamer

Grafische Darstellung



Kugel-Stab-Modell (engl. ball and stick model)

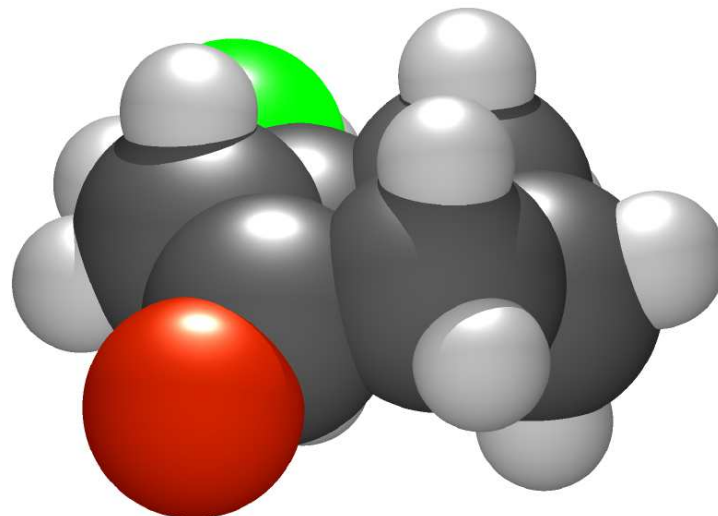
Vorteil:

- Guter räumlicher Eindruck

Nachteil:

- Darstellung rechenaufwändig

Grafische Darstellung



Raumfüllendes Modell (space filling model, CPK model)

Vorteil:

- Eindruck von Atomgrößen

Nachteil:

- Struktur nicht gut zu erfassen

Kartesische Koordinaten

Koordinaten beschreiben Struktur des Moleküls

- Eindeutig

Verschiedene kartesische Koordinaten für ein Molekül möglich

- Verschiebung des Moleküls (Translation)
- Drehung um Masseschwerpunkt (Rotation)
- nicht ein-eindeutig

Topologische Darstellung

Ein-eindeutige Darstellung:

- Jede Verbindung hat eine Darstellung
- Jede Darstellung entspricht einer Verbindung

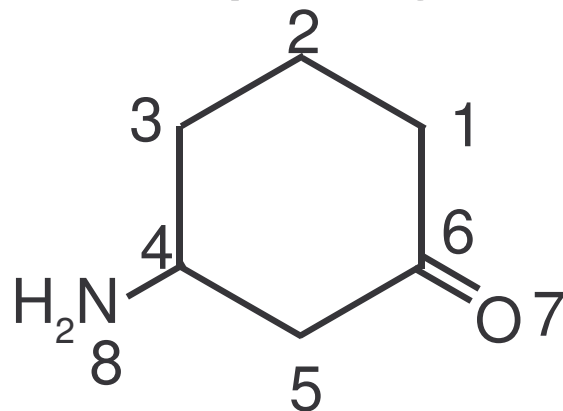
Vollständige Darstellung:

- Struktur wird vollständig beschrieben

Kompakte Darstellung

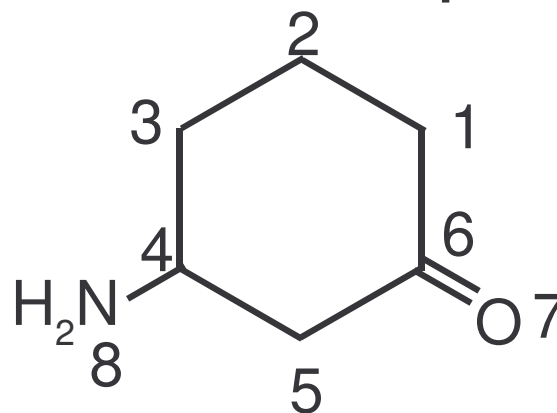
- möglichst geringer Speicherbedarf

Verknüpfungstabelle



	1	2	3	4	5	6	7	8
1	C	1	0	0	0	1	0	0
2	1	C	1	0	0	0	0	0
3	0	1	C	1	0	0	0	0
4	0	0	1	C	1	0	0	1
5	0	0	0	1	C	1	0	0
6	1	0	0	0	1	C	2	0
7	0	0	0	0	0	2	O	0
8	0	0	0	1	0	0	0	N

Kompakte Verknüpfungstabelle



1	C	0	0	0	0
2	C	1	1	0	0
3	C	2	1	0	0
4	C	3	1	0	0
5	C	4	1	0	0
6	C	1	1	5	1
7	O	6	2	0	0
8	N	4	1	0	0

Eindeutige Verknüpfungstabelle

Problem:

- Ein-eindeutige Darstellung erfordert eindeutige Festlegung für Atomnumerierung
- Kanonische Darstellung

Morgans Algorithmus

- Von L. Morgan entwickelter Algorithmus zur Festlegung der Reihenfolge

Morgans Algorithmus

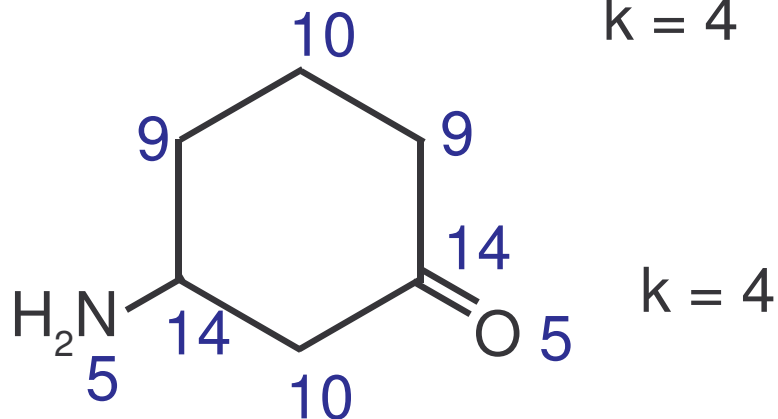
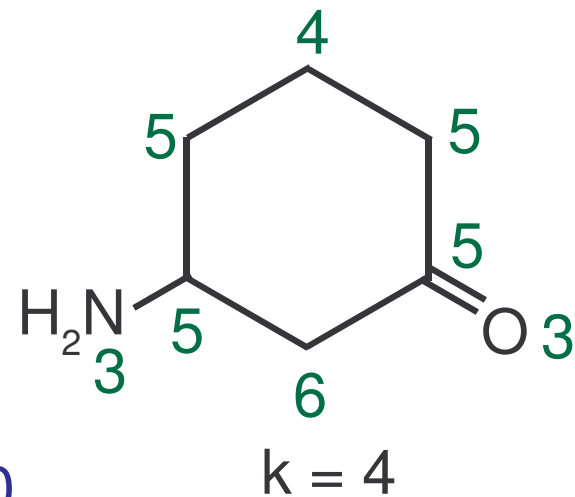
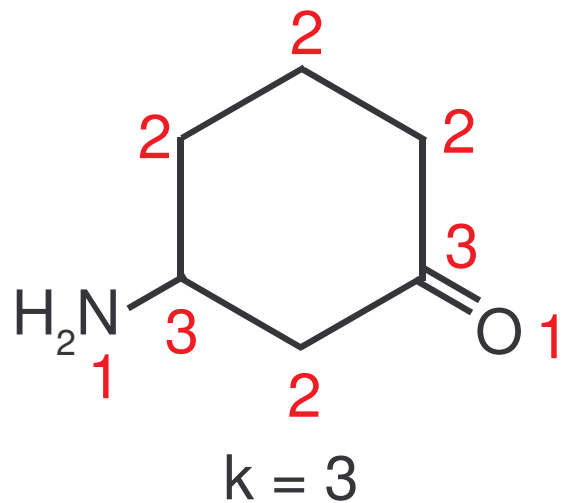
- Berechne für jedes Atom die Anzahl der nächsten Nachbarn („Konnektivitätswert“) und zähle die Anzahl k an verschiedenen Werten
- Addiere für jedes Atom die Werte der Nachbarn und zähle k
- Wiederhole solange, bis k nicht ansteigt

Morgans Algorithmus

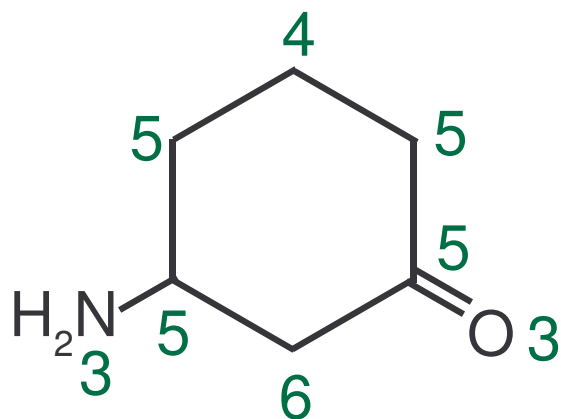
- Fortlaufende Numerierung der jeweils nächsten Nachbarn nach sinkenden Konnektivitätswerten
- Bei gleichen Werten:
 - Alphabetische Sortierung nach Elementsymbol
 - Steigende Bindungsordnung

L. Morgan, J. Chem. Doc., 5, (1965), 107.

Beispiel



Beispiel



Nummerierung:

