

Inhaltsverzeichnis

Seite

I.	Einleitung	1
	Vorbemerkung	1
1.	Voraussetzungen von CHEMIS	2
2.	Warum "organische Chemie?"	8
3.	Analyse des Problemlösungsverhaltens	11
II.	Systementwicklung	14
1.	Aufbau von CHEMIS	14
2.	Problembeschreibung, Datenbasis	17
2.1	Formale Problembeschreibung	19
2.2	Problemtypen	20
3.	Ergebnisse	22
3.1	Fakten-Retrieval	22
3.2	Verarbeitung von Daten	32
3.3	Transformations-, Kompositions- probleme	37
3.3.1	Suche nach Reaktionen	41
3.3.2	Maschinelle Durchführung der Syn- thesewege	42
3.3.3	Erklärung und Bildung der Re- aktionsketten	43
3.3.4	Einschränkung des Suchraumes	51
3.3.5	Bewertung der Reaktionsketten	60
4.	Verfahren	62
5.	Ähnlichkeitslisten	68
5.1	Einteilung der organischen Ver- bindungen	68
5.2	Chemische Ähnlichkeit	69
5.3	Folgerungen	73
5.4	Der maschinelle Vergleich	74
5.5	Beschreibung des Algorithmus	76
5.6	Bewertung und Ergebnisse	82

III.	Peptidsynthesen	90
1.	Systemanalyse	90
2.	Computer-Simulation des Peptid-Synthesemodells	107
	a) Fakten-Retrieval	107
	b) Teilautomatisierte Problemlösung	111
IV	Chlorformamidin-Chemie	117
1.	Zur Auswahl des behandelten Gebietes	117
2.	Daten	119
	a) Daten zu Verbindungen	119
	b) Infrarot-Spektren	121
	c) Kernresonanzspektren	125
	d) Reaktionsgleichungen	127
3.	Heuristiken	131
	a) Spezifische Heuristiken in der Chlorformamidin-Chemie	132
	b) Diskussion der Hydrolyseempfindlichkeit der Chlorformamide	138
V.	Zusammenfassung und Ausblick	141