



VORLESUNG:

- **Moleküle am Computer**
 - Beispiel Discovery Studio Viewer
- **Molekülstrukturen im Internet**
 - CSD: Organische Moleküle mittlerer Größe
 - PDB: Proteine und andere Biomakromol.
- **Einfaches Molecular Modeling**
 - Molecular Mechanics mit HyperChem
- **Chemische Literatur Online**
 - Elektronische Zeitschriftenbibliothek
 - Chemical Abstracts (SciFinder)
 - Beilstein und Gmelin (Reaxys)
 - Andere: Entrez, Pubmed, MedLine etc.

ÜBUNG:

- **Molecular Modeling**
 - HyperChem
 - Eingabe einer Molekülstruktur
 - Optimierung der Struktur
 - Molekulardynamik
 - Simulated Annealing