

**Kraftfeld-basierte Untersuchungen der Wechselwirkung
von Liganden mit Cellulose-Oberflächen
und
Erstellung eines webbasierten Services zur interaktiven Berechnung von
Reaktionsanimationen mehrstufiger organischer Reaktionen**

Oliver Stüker

Im Rahmen dieser Dissertation wurden die Wechselwirkungen zwischen Celluloseoberflächen und verschiedenen Liganden untersucht sowie ein Webservice zur interaktiven Erstellung von Animationen für verschiedene ein- und mehrstufige organische Reaktionen entwickelt.

Cellulose, das häufigste Biopolymer der Erde, ist seit jeher ein sehr wichtiges Material. Unter der Prämisse, diesen Werkstoff durch Oberflächenbehandlung zu modifizieren und so an die Anforderungen und Bedürfnisse optimal anzupassen, gewinnt es immer mehr an Bedeutung, im Vorfeld mit Hilfe von theoretischen Methoden und Computer-Simulationen Vorhersagen zu treffen, wie gut diese Stoffe mit der Cellulose interagieren und an diese gebunden werden. Dafür wurde ein Verfahren entwickelt, das durch die Kombination von Monte-Carlo (MC)-Docking und Molekular Dynamik (MD)-Simulationen erlaubt, Liganden auf einer Cellulose-Oberfläche zu positionieren und deren Mobilität in einer MD-Simulation zu beobachten. Für eine halbquantitative Beurteilung der Beweglichkeit wurde ein mehrstufiges numerisches Auswertungsverfahren auf der Basis von radialen Verteilungsfunktionen (RDF) zwischen Ligand- und Cellulose-Atomen erarbeitet.

Die Visualisierung chemischer Reaktionen in Form von Computeranimationen soll ein besseres Verständnis der Abläufe von Reaktionsmechanismen auf molekularer Ebene ermöglichen. In der Lehre sind vorgefertigte Animationen vor allem ein Hilfsmittel für den Lehrenden, um das Wissen über die Abläufe zu vermitteln.

Mit iORAO [1] wurde ein interaktives System zur Erstellung von dreidimensionalen Animationen auch mehrstufiger organischer Reaktionen entwickelt, das es dem Benutzer erlaubt, durch Manipulation der beteiligten Moleküle aktiv in das Geschehen einzugreifen und das Ergebnis zu verändern. Dies soll vor allem den Lernenden dazu veranlassen, den Einfluss verschiedener funktioneller Gruppen auf die Reaktionen und deren Verlauf zu studieren. iORAO ist über das Internet frei zugänglich und so konzipiert, dass es leicht in andere Sprachen übersetzt und einfach um weitere Reaktionen erweitert werden kann.

[1] Stueker, O. iORAO: Interactive Organic Reaction Animation Online.
<http://oc24.uni-paderborn.de/iorao> (visited 2008)