

Abstract

English

ERIS is a free Java software for chemists to examine molecules and enzymatic reactions. Besides visualization and editing of chemical structures it also provides interaction with a database storing small molecules and enzymatic reactions. Furthermore it uses a couple of chemoinformatics libraries enabling the user to conduct Similarity - as well as Sub- and Superstructure Searches for molecules. But also reaction searches based on the compounds structure or the bond changes can be performed.

In order to understand how a reaction takes place it is possible to execute an Atom-Atom-Mapping algorithm which can be utilized to visualize the bond changes taken place and also the transition state of that reaction.

Since the database not only stores the structure but also physico-chemical properties of molecules it becomes possible to search for physico-chemical properties yielding appropriate molecules.

German

ERIS ist eine frei verfügbare Java software für Chemiker um Moleküle und enzymatische Reaktionen zu untersuchen. Neben der Visualisierung und Bearbeitung von chemischen Strukturen ist es auch möglich auf eine Datenbank welche Moleküle und Enzymreaktionen speichert zuzugreifen. Es werden verschiedene Chemoinformatik Bibliotheken verwendet, um Ähnlichkeits-, Sub- und Superstrukturen Suchen für Moleküle zur Verfügung zu stellen. Weiters ist es aber auch möglich Reaktions-Suchen basierend auf deren Edukt- und Produktstrukturen oder deren Bindungsänderungen durchzuführen.

Um den Ablauf einer Reaktion besser zu verstehen ist es möglich einen Atom-Atom-Mapping Algorithmus anzuwenden mit dem in weiterer Folge die Bindungsänderungen einer Reaktion sowie deren bergangszustand angezeigt werden kann.

Da in der verwendeten Datenbank nicht nur die Struktur sondern auch physikalisch-chemische Eigenschaften der Moleküle gespeichert ist, kann auch nach diesen Attributen gesucht werden und passende Moleküle dafür ausgegeben werden.