

Das Dokumentationsproblem in der Ultrarotspektroskopie¹⁾

Von Prof. Dr. R. MECKE und Dipl.-Phys. E. D. SCHMID

Aus dem Institut für physikalische Chemie der Universität Freiburg i. Br.

Die Dokumentation von UR-Spektren gelingt mit den herkömmlichen Mitteln nur unvollkommen. Randlochkarten und die sog. IBM-Karten aber vermögen die Dokumentationsanforderungen zu erfüllen. Sie können nicht nur die gewonnenen Erkenntnisse zweckmäßig speichern und schnell vollständige Auskünfte vermitteln, sondern sogar dazu belagern, neue Hinweise auf Zusammenhänge und Gesetzmäßigkeiten zu erkennen.

Seit einigen Jahren werden in zunehmendem Maße automatisch registrierende Ultrarotspektrographen in Forschung und Technik verwendet. Damit wächst auch die Zahl der aufgenommenen UR-Spekrogramme, und es ist eine ernste Krise in der Dokumentation der Ultrarotabsorptionsdaten entstanden. Die Spekrogramme sind über zahlreiche Institute und Forschungsstellen verstreut und ihre Zahl ist schwer zu schätzen; sie dürfte jedoch 10000 bereits erheblich überschritten haben. Hieraus erwächst die dringende Notwendigkeit, eine Institution ins Leben zu rufen, die das vorliegende und weiter anfallende Material sammelt, ordnet und jedem Interessenten zugänglich macht.

Die herkömmlichen Informationsquellen über die Ultrarotabsorptionsdaten sind: Zeitschriften, Handbücher, Monographien²⁾ und die laufende Dokumentation³⁾. Hinzu kommen eine Anzahl von Spektrenkatalogen, wie z. B. der API-Katalog⁴⁾ und der von Samuel P. Sadler⁵⁾ aufgestellte⁶⁾; sie bestehen aus Kopien registrierter Spektren. Neben einem Vermerk über Herkunft und Aggregatzustand der Substanz, Herstellungsort des Spektrums und Länge der verwendeten Küvette enthalten diese Kopien aber häufig nur rohe Angaben über den chemischen Reinheitsgrad. Meist wurden Spektren der handelsüblichen Materialien aufgenommen, da die Herstellung von Reinstsubstanzen nicht nur zeitraubend, sondern auch sehr kostspielig oder aus chemischen Gründen grundsätzlich unmöglich ist. Für analytische Zwecke ist die Güte dieser Spektren vielfach ausreichend und von großem Wert; sie sind in kurzer Zeit in vielen Zweigen der Chemie, vor allem in der chemischen Industrie der USA, zu einem unentbehrlichen analytischen Hilfsmittel geworden. In diesem Sinne besteht der häufig zitierte Satz zu Recht: „Irgendein Spektrum ist besser als kein Spektrum“. Hat man jedoch das Bestreben, die Spektren zu deuten, d. h. die beobachteten Banden bestimmten Molekelschwingungen bzw. Rotationszuständen zuzuordnen mit dem Ziel, u. a. über Bindungsverhältnisse und Molekellstruktur Kenntnisse zu gewinnen, so sind Spektren rein-

ster Substanzen unentbehrlich⁷⁾). Forschungen dieser Art könnten jedoch auch durch die Spektren der Kataloge gestützt werden, wenn zu diesen entweder quantitative Angaben über den Reinheitsgrad der verwendeten Substanzen verfügbar wären, oder, sofern dies nicht möglich ist, hinreichende Angaben über deren Präparation; m. a. W., die Reproduzierbarkeit der Spektren müßte gewährleistet sein. Daß dies nicht der Fall ist, sehen wir als einen nicht übersehbaren Mangel an. Die Anlage der Kataloge ist derart, daß das Auffinden eines Spektrums bei vorgegebenem Substanznamen ohne große Mühe möglich ist. Der hierzu inverse Prozeß ist jedoch unmöglich; das Auffinden der zu einem bestimmten Spektrum gehörenden Substanz bzw. Substanzen stößt auf unüberwindliche Schwierigkeiten.

Dieser Mangel, der auch den oben genannten Quellen anhaftet, erschwert entscheidend das Arbeiten im Bereich der Ultrarotspektroskopie. Es ist hier nicht die Stelle, weitere Vor- und Nachteile dieser Informationsquellen abzuwägen. Offenkundig ist, daß sie einige wesentliche Dokumentationswünsche nicht erfüllen.

Das Ziel aller Dokumentationsbemühungen wird wohl erst dann erreicht sein, wenn für den einzelnen Forscher grundsätzlich die Möglichkeit besteht, über das zu einer bestimmten Fragestellung gehörende, bereits vorhandene Erkenntnisgut eine hinreichende Information zu erhalten. Der hierzu erforderliche Zeitaufwand muß in tragbaren Grenzen bleiben. Es mag einer grundsätzlichen Betrachtung vorbehalten bleiben, Verfahrensweisen zu erörtern, die dazu geeignet sind, einem solchen Ziele näher zu kommen.

Neuerdings ist man bestrebt, vor allem in USA, nunmehr auch auf dem Gebiet der Ultrarotspektroskopie die Dokumentation durch Verwendung von Lochkarten günstiger zu gestalten; über diese Bemühungen wird im folgenden berichtet. In diesen Karten wird das Kenntnisgut gespeichert. Man ist bemüht, die Speicherung so vorzunehmen, daß die Sortierung nach einem gewählten Ordnungsprinzip maschinell bzw. manuell sicher und rasch möglich ist.

Lochkarten als Hilfsmittel zur Dokumentation von Ultrarotabsorptionsdaten⁸⁾.

Die Lochkarte, deren Verwendbarkeit zur Dokumentation der Ultrarotabsorptionsdaten nunmehr besprochen werden soll, ist heute in zwei Kartensystemen im Gebrauch: die IBM-Karte mit maschineller und die Randlochkarte mit manueller Sortierung. Entscheidend

¹⁾ Vorgetragen von E. D. Schmid anlässlich der von Prof. Dr. R. Mecke veranstalteten „Aussprache über Technik der Ultrarotspektroskopie“ vom 17. bis 18. 11. 1952 im Institut für physikalische Chemie der Universität Freiburg i. Br.

²⁾ Handbücher: „Geiger-Scheel“, „Wien-Harms“, „Eucken-Wolf“, „Landoit-Bornstein“, I. Band, 2. Teil Molekeln I (Meier, Mecke/Kerkhof, Pajenkamp, Seidel) „Infrared Determination of Organic Structures“ (Randall, Fowler, Fuson, Dangl), 1949, D. van Nostrand Company, Inc., New York.

Monographien: „Molecular Spectra and Molecular Structure II“, G. Herzberg, D. van Nostrand Company, Inc., New York. — „Vibration Spectra and Structure of Polyatomic Molecules“, T. Y. Wu (National Univers. Peking, Kun-ming China, 1939), u. a. m.

³⁾ Chemisches Zentralblatt, Physikalische Berichte, Chemical Abstracts, u. a. m. Besonders zu erwähnen ist das jährlich in „Analytical Chemistry“ erscheinende Referat von R. C. Gore „Infrared Spectroscopy“.

⁴⁾ API: American Petroleum Institute Research Project 44, National Bureau of Standards, Washington, D. C. In diesem Katalog sind bis heute etwa 1300 Spektren erfaßt.

⁵⁾ Samuel P. Sadler & Son, Inc., 2100 Arch Street, Philadelphia 3, Pa.

⁶⁾ Der Katalog des Institutes für physikalische Chemie der Universität Freiburg i. Br. umfaßt bis jetzt 800 Spektren, die mit dem Perkin-Elmer Mod. 21 registriert worden sind.

⁷⁾ Die Perkin-Elmer Corporation, Norwalk Connecticut, USA, hat unter Leitung von V. Z. Williams mit dem Aufbau eines Reinstspektrenkatalogen begonnen.

⁸⁾ Auf zahlreichen anderen Gebieten hat sich die Lochkarte als Hilfsmittel der Dokumentation gut bewährt. So werden z. B. die Versuche, komplizierte organische Substanzen mit Hilfe der Massenspektren ihrer Verbrennungsprodukte zu identifizieren, neuerdings durch die Verwendung von Lochkarten erleichtert; siehe: P. D. Zemany, Analyt. Chemistry 24, 11 [1952]. Vgl. auch W. Gruber, „Randlochkarten für die Dokumentation organ. Verb.“, diese Ztschr. 65, 230 [1953].

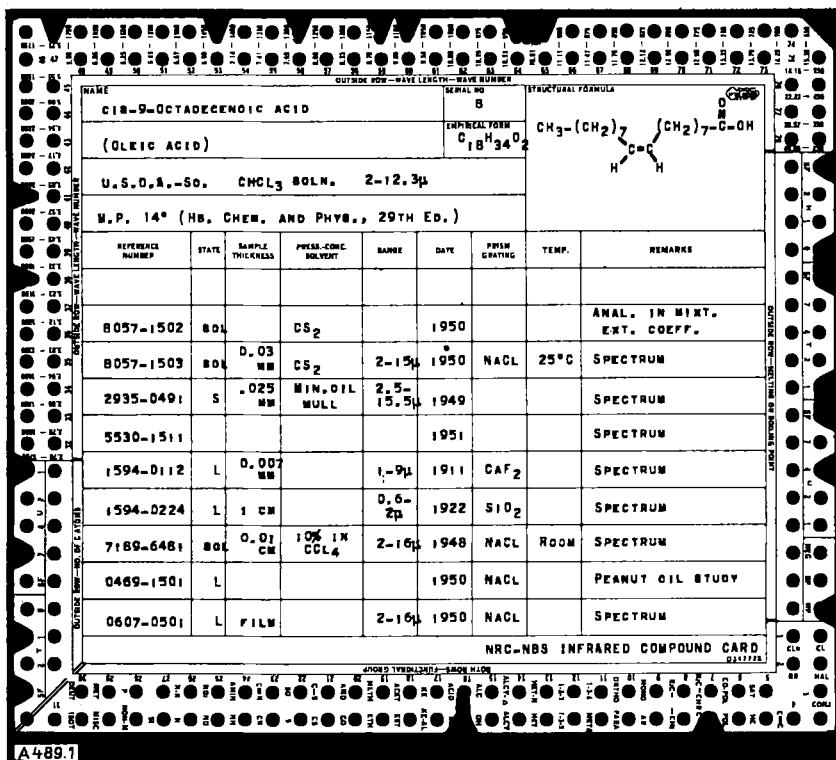


Bild 1. Vorderseite der „compound card“

bei beiden Kartensystemen ist, daß jedem einzelnen der vorgesehenen (IBM-Karte) oder bereits vorgegebenen (Randlochkarre) Löcher definierte Erkenntnisinhalte bzw. Sachverhalte zugeordnet werden können, wie sie z. B. in Veröffentlichungen vorliegen.

Schon vor mehreren Jahren wurde in den USA der Gedanke aufgegriffen, die Lochkarte als Hilfsmittel zur Dokumentation der Ultrarotdaten heranzuziehen⁹⁾). Als dort 1948 ein „Punch Card Committee“

gegründet wurde, existierten im Bereich der Spektroskopie bereits 18 verschiedene Kartensysteme. Das Komitee machte es sich zur Aufgabe, diese Systeme, die naturgemäß nicht zu übersehende Mängel aufwiesen, in dem Bestreben zu studieren, eine Karte zu entwickeln, die den gestellten Forderungen so weit als möglich Rechnung trägt. Die Untersuchungen des Komitees sind heute¹⁰⁾ abgeschlossen; das Ergebnis ist ein Zwei-Kartensystem¹¹⁾. Es besteht aus einer gelben „compound card“ (Bild 1 und 2) und einer weißen „bibliography card“ (Bild 3); beide Karten sind Randlochkarten. Die „compound card“ enthält außer den

*) Das wahrscheinlich z. Zt. beste Buch über die Anwendung von Lochkarten ist jenes von *Robert S. Casey* und *James W. Perry*, „Punched Cards“; Reinhold Publishing Corporation, New York.

¹⁰⁾ Publishing Corporation, New York.
Im Juli 1951 wurde das Komitee vom
National Research Council übernommen.
Die gegenwärtige Leitung hat Dr. Wallace
R. Brode, National Bureau of Standards,
Sekretär ist E. Carroll Creitz, National
Bureau of Standards.

11) Die hier über dieses System gemachten Angaben stammen von *E. Carroll Creitz*, der uns freundlicherweise laufend über den Stand der Arbeiten des Punch Card Committees unterrichtet hat.

Wellenlängenwerten der Absorptionsbanden u. a. die funktionellen Gruppen, Schmelz- bzw. Siedepunkt, ein aufgedrucktes Diagramm des Spektrums und Literaturzitate, die mit einem Zahlenschlüssel versehen sind. Dieser Zahlenschlüssel ist auf der „*bibliography card*“ gelocht, so daß ein Auffinden der betreffenden Karte leicht möglich ist. Die Karten haben eine Größe von $6\frac{1}{8}$ " mal $7\frac{1}{8}$ ".

A) Beschreibung der compound card

Wie aus Bild 1 zu ersehen ist, ist der Rand der Karte in vier Bereiche eingeteilt, in denen aufgenommen werden: (1) Lage der Hauptabsorptionsbanden (*outside row - wave length - wave number*), (2) Schmelz- oder Siedepunkt (*outside row - melting or boiling point*), (3) funktionelle Gruppen (*both rows - functional group*), (4) Zahl der Kohlenstoffatome (*outside row - No. of C atoms*).

Die Bereiche (1) und (2) erlauben eine Verwendung im Fall von unbekannten Verbindungen und die Bereiche (3) und (4) im Fall von bekannten Verbindungen.

(1) Die Wellenlängenwerte werden von $2,7 \mu$ (3700 cm^{-1}) bis 40μ (250 cm^{-1}) in nichtlinearen Intervallen aufgenommen. Bemerkenswert an dieser Einteilung ist, daß in dem Bereich von 1750 cm^{-1} bis 650 cm^{-1} , dem sog. „finger-print“-Bereich, der bei der Sortierung am häufigsten verwandt wird, ein enges Intervall von 50 cm^{-1} von Loch zu Loch gewählt wurde. Benutzt wird nur die äußere Lochreihe; durch zusätzliche Verwendung der inneren

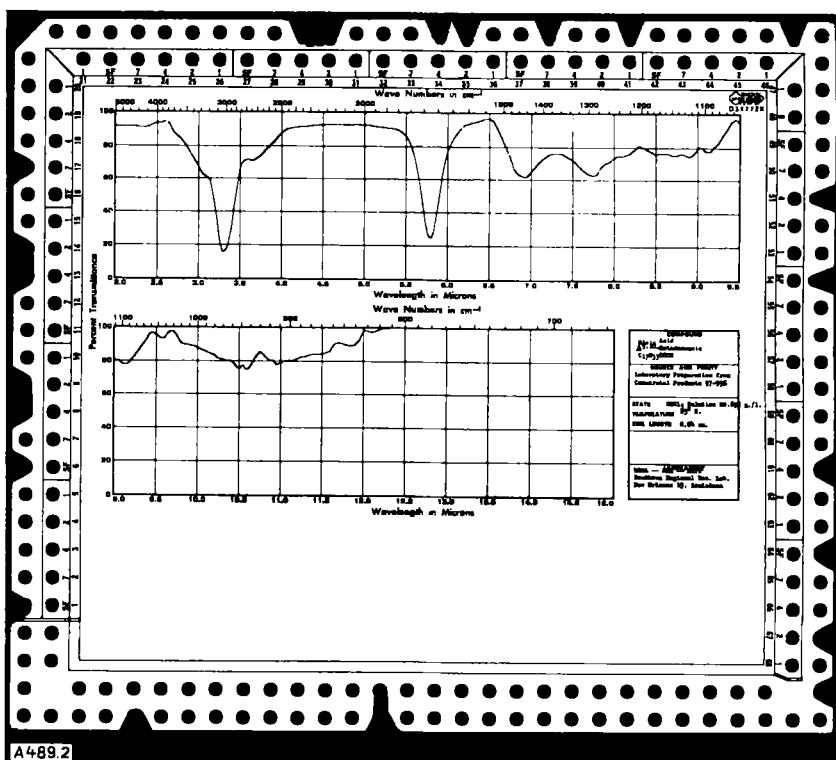


Bild 2. Rückseite der „compound card“

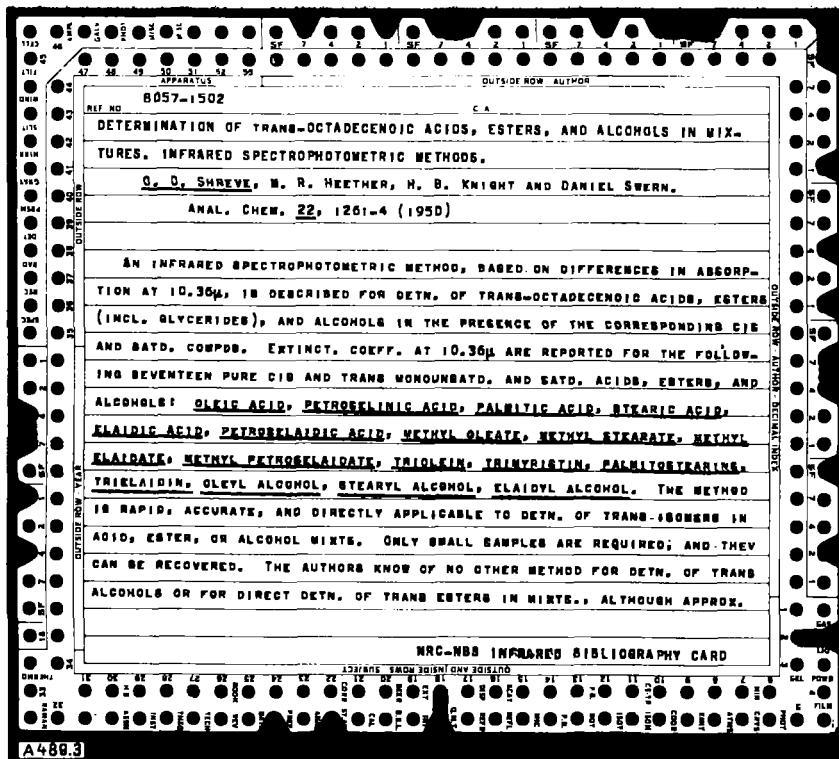


Bild 3. „bibliography card“

Lochreihen können die Intervalle verkleinert werden, wodurch die Auflösung vergrößert wird.

(2) Die Angaben über Schmelz- oder Siedepunkt werden mit dem Schlüssel 1, 2, 4, 7, SF angegeben. Wenn der mitzuteilende Wert kleiner als Null ist, wird das Loch „negativ“ gekerbt. Die Unterbereiche zur Aufnahme der Einer und Zehner enthalten die Null nicht. Für diesen Fall wird die Null durch Kerbung von 4 und 7 angezeigt. In jedem der drei Unterbereiche werden stets zwei Löcher gekerbt; ist die zu kerbende Zahl selbst ein Element des Schlüssels, wie z. B. 4, so wird zusätzlich das mit SF bezeichnete Loch gekerbt. Durch die Verwendung dieses Bereiches werden die Bemühungen, das Spektrum einer unbekannten Verbindung zu identifizieren, erleichtert.

(3) Sämtliche Löcher dieses Bereiches, mit den laufenden Nummern 1 bis 31 einschließlich, werden zur Aufnahme eines Code der funktionellen Gruppen verwendet. Dies ist der einzige Bereich der *compound card*, in welchem sowohl die äußere als auch die innere Lochreihe benutzt wird; dadurch ist es möglich, sämtliche bekannten funktionellen Gruppen in die Karte aufzunehmen.

(4) Die Zahl der Kohlenstoffatome wird wieder wie in (1) angegeben, unter Verwendung des Schlüssels 1, 2, 4, 7, SF. Die Null im Unterbereich der Einer wird wieder durch 4 und 7 gekennzeichnet. Ist die Zahl „39“ gekerbt, so bedeutet dies, daß die Substanz 39 oder mehr Kohlenstoffatome enthält. Durchein Verwendung dieses Bereiches

der Karte mit nachfolgender ein- oder mehrmaliger Sortierung im Bereich der funktionellen Gruppen kann das Spektrum einer bekannten Verbindung sehr schnell gefunden werden.

Außer den durch Kerbung bestimmten Löcher bzw. Lochfolgen in die Karte aufgenommenen Erkenntnisinhalten sind auf die Karte noch einige allgemeine Informationen gedruckt; im oberen Drittel der Karte u. a. Name der Substanz, Summenformel, Strukturformel. Die Tabelle auf der Karte dient zur Aufnahme von Literaturdaten. In der ersten Spalte ist die „reference number“ angeführt; dies ist die Nummer einer bestimmten *bibliography card*. Wie schon erwähnt, finden nur zur Aufnahme der funktionellen Gruppen sowohl die innere als auch die äußere Lochreihe Verwendung. Die inneren Lochreihen der anderen Bereiche stehen den einzelnen Laboratorien zur Aufnahme individueller Informationen zur Verfügung. Diese Löcher sind auf der Rückseite der Karte, siehe Bild 2, numeriert.

B) Beschreibung der „bibliography card“

Die Lochreihen dieser Karte, deren wesentlicher Inhalt ein Abstrakt einer publizierten Arbeit ist, sind wie bei der *compound card* in vier Bereiche eingeteilt: (1) Angabe der „reference number“ unter Benutzung des 1, 2, 4, 7, SF-Code. (2) In diesem Bereich wird die innere und die äußere Lochreihe zur subjektiven Klassifizierung benutzt. Der Bereich (4) nimmt eine subjektive Klassifizierung hinsichtlich der Instrumentation auf.

(1) Die ersten fünf Zahlen der „reference number“ dienen zur eindeutigen Verschlüsselung der Autorennamen. Die beiden nächsten Zahlen sind die beiden letzten Zahlen des Erscheinungsjahres der Publikation. Die achte und letzte Zahl der „reference number“ gibt die Zahl der von dem betreffenden Autor im Erscheinungsjahr publizierten Arbeiten an.

Die drei anderen Bereiche der Karte bedürfen keiner weiteren Erläuterung. Wenn in dem Bereich „year of publication“ 18 gekerbt ist, so bedeutet dies 1800, ist dies nicht der Fall, so 1900.

| INFRARED ABSORPTIONS TO 0.1 MICRON | | CHEMICAL CLASSIFICATION (1956 CODE LIST) | | NUMBER OF ATOMS | | IDENTIFICATION | |
|---------------------------------------|---|---------------------------------------------|---|--------------------|---|----------------|---|
| | | A | B | C | D | E | F |
| 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 |
| 2 | 2 | 2 | 2 | 2 | 2 | 2 | 2 |
| 3 | 3 | 3 | 3 | 3 | 3 | 3 | 3 |
| 4 | 4 | 4 | 4 | 4 | 4 | 4 | 4 |
| 5 | 5 | 5 | 5 | 5 | 5 | 5 | 5 |
| 6 | 6 | 6 | 6 | 6 | 6 | 6 | 6 |
| 7 | 7 | 7 | 7 | 7 | 7 | 7 | 7 |
| 8 | 8 | 8 | 8 | 8 | 8 | 8 | 8 |
| 9 | 9 | 9 | 9 | 9 | 9 | 9 | 9 |
| 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 |
| 2 | 2 | 2 | 2 | 2 | 2 | 2 | 2 |
| 3 | 3 | 3 | 3 | 3 | 3 | 3 | 3 |
| 4 | 4 | 4 | 4 | 4 | 4 | 4 | 4 |
| 5 | 5 | 5 | 5 | 5 | 5 | 5 | 5 |
| 6 | 6 | 6 | 6 | 6 | 6 | 6 | 6 |
| 7 | 7 | 7 | 7 | 7 | 7 | 7 | 7 |
| 8 | 8 | 8 | 8 | 8 | 8 | 8 | 8 |
| 9 | 9 | 9 | 9 | 9 | 9 | 9 | 9 |
| 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 |
| 2 | 2 | 2 | 2 | 2 | 2 | 2 | 2 |
| 3 | 3 | 3 | 3 | 3 | 3 | 3 | 3 |
| 4 | 4 | 4 | 4 | 4 | 4 | 4 | 4 |
| 5 | 5 | 5 | 5 | 5 | 5 | 5 | 5 |
| 6 | 6 | 6 | 6 | 6 | 6 | 6 | 6 |
| 7 | 7 | 7 | 7 | 7 | 7 | 7 | 7 |
| 8 | 8 | 8 | 8 | 8 | 8 | 8 | 8 |
| 9 | 9 | 9 | 9 | 9 | 9 | 9 | 9 |
| 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 |
| 2 | 2 | 2 | 2 | 2 | 2 | 2 | 2 |
| 3 | 3 | 3 | 3 | 3 | 3 | 3 | 3 |
| 4 | 4 | 4 | 4 | 4 | 4 | 4 | 4 |
| 5 | 5 | 5 | 5 | 5 | 5 | 5 | 5 |
| 6 | 6 | 6 | 6 | 6 | 6 | 6 | 6 |
| 7 | 7 | 7 | 7 | 7 | 7 | 7 | 7 |
| 8 | 8 | 8 | 8 | 8 | 8 | 8 | 8 |
| 9 | 9 | 9 | 9 | 9 | 9 | 9 | 9 |
| 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 |
| 2 | 2 | 2 | 2 | 2 | 2 | 2 | 2 |
| 3 | 3 | 3 | 3 | 3 | 3 | 3 | 3 |
| 4 | 4 | 4 | 4 | 4 | 4 | 4 | 4 |
| 5 | 5 | 5 | 5 | 5 | 5 | 5 | 5 |
| 6 | 6 | 6 | 6 | 6 | 6 | 6 | 6 |
| 7 | 7 | 7 | 7 | 7 | 7 | 7 | 7 |
| 8 | 8 | 8 | 8 | 8 | 8 | 8 | 8 |
| 9 | 9 | 9 | 9 | 9 | 9 | 9 | 9 |
| 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 |
| 2 | 2 | 2 | 2 | 2 | 2 | 2 | 2 |
| 3 | 3 | 3 | 3 | 3 | 3 | 3 | 3 |
| 4 | 4 | 4 | 4 | 4 | 4 | 4 | 4 |
| 5 | 5 | 5 | 5 | 5 | 5 | 5 | 5 |
| 6 | 6 | 6 | 6 | 6 | 6 | 6 | 6 |
| 7 | 7 | 7 | 7 | 7 | 7 | 7 | 7 |
| 8 | 8 | 8 | 8 | 8 | 8 | 8 | 8 |
| 9 | 9 | 9 | 9 | 9 | 9 | 9 | 9 |
| 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 |
| 2 | 2 | 2 | 2 | 2 | 2 | 2 | 2 |
| 3 | 3 | 3 | 3 | 3 | 3 | 3 | 3 |
| 4 | 4 | 4 | 4 | 4 | 4 | 4 | 4 |
| 5 | 5 | 5 | 5 | 5 | 5 | 5 | 5 |
| 6 | 6 | 6 | 6 | 6 | 6 | 6 | 6 |
| 7 | 7 | 7 | 7 | 7 | 7 | 7 | 7 |
| 8 | 8 | 8 | 8 | 8 | 8 | 8 | 8 |
| 9 | 9 | 9 | 9 | 9 | 9 | 9 | 9 |
| 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 |
| 2 | 2 | 2 | 2 | 2 | 2 | 2 | 2 |
| 3 | 3 | 3 | 3 | 3 | 3 | 3 | 3 |
| 4 | 4 | 4 | 4 | 4 | 4 | 4 | 4 |
| 5 | 5 | 5 | 5 | 5 | 5 | 5 | 5 |
| 6 | 6 | 6 | 6 | 6 | 6 | 6 | 6 |
| 7 | 7 | 7 | 7 | 7 | 7 | 7 | 7 |
| 8 | 8 | 8 | 8 | 8 | 8 | 8 | 8 |
| 9 | 9 | 9 | 9 | 9 | 9 | 9 | 9 |
| 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 |
| 2 | 2 | 2 | 2 | 2 | 2 | 2 | 2 |
| 3 | 3 | 3 | 3 | 3 | 3 | 3 | 3 |
| 4 | 4 | 4 | 4 | 4 | 4 | 4 | 4 |
| 5 | 5 | 5 | 5 | 5 | 5 | 5 | 5 |
| 6 | 6 | 6 | 6 | 6 | 6 | 6 | 6 |
| 7 | 7 | 7 | 7 | 7 | 7 | 7 | 7 |
| 8 | 8 | 8 | 8 | 8 | 8 | 8 | 8 |
| 9 | 9 | 9 | 9 | 9 | 9 | 9 | 9 |
| 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 |
| 2 | 2 | 2 | 2 | 2 | 2 | 2 | 2 |
| 3 | 3 | 3 | 3 | 3 | 3 | 3 | 3 |
| 4 | 4 | 4 | 4 | 4 | 4 | 4 | 4 |
| 5 | 5 | 5 | 5 | 5 | 5 | 5 | 5 |
| 6 | 6 | 6 | 6 | 6 | 6 | 6 | 6 |
| 7 | 7 | 7 | 7 | 7 | 7 | 7 | 7 |
| 8 | 8 | 8 | 8 | 8 | 8 | 8 | 8 |
| 9 | 9 | 9 | 9 | 9 | 9 | 9 | 9 |
| 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 |
| 2 | 2 | 2 | 2 | 2 | 2 | 2 | 2 |
| 3 | 3 | 3 | 3 | 3 | 3 | 3 | 3 |
| 4 | 4 | 4 | 4 | 4 | 4 | 4 | 4 |
| 5 | 5 | 5 | 5 | 5 | 5 | 5 | 5 |
| 6 | 6 | 6 | 6 | 6 | 6 | 6 | 6 |
| 7 | 7 | 7 | 7 | 7 | 7 | 7 | 7 |
| 8 | 8 | 8 | 8 | 8 | 8 | 8 | 8 |
| 9 | 9 | 9 | 9 | 9 | 9 | 9 | 9 |
| 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 |
| 2 | 2 | 2 | 2 | 2 | 2 | 2 | 2 |
| 3 | 3 | 3 | 3 | 3 | 3 | 3 | 3 |
| 4 | 4 | 4 | 4 | 4 | 4 | 4 | 4 |
| 5 | 5 | 5 | 5 | 5 | 5 | 5 | 5 |
| 6 | 6 | 6 | 6 | 6 | 6 | 6 | 6 |
| 7 | 7 | 7 | 7 | 7 | 7 | 7 | 7 |
| 8 | 8 | 8 | 8 | 8 | 8 | 8 | 8 |
| 9 | 9 | 9 | 9 | 9 | 9 | 9 | 9 |
| 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 |
| 2 | 2 | 2 | 2 | 2 | 2 | 2 | 2 |
| 3 | 3 | 3 | 3 | 3 | 3 | 3 | 3 |
| 4 | 4 | 4 | 4 | 4 | 4 | 4 | 4 |
| 5 | 5 | 5 | 5 | 5 | 5 | 5 | 5 |
| 6 | 6 | 6 | 6 | 6 | 6 | 6 | 6 |
| 7 | 7 | 7 | 7 | 7 | 7 | 7 | 7 |
| 8 | 8 | 8 | 8 | 8 | 8 | 8 | 8 |
| 9 | 9 | 9 | 9 | 9 | 9 | 9 | 9 |
| 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 |
| 2 | 2 | 2 | 2 | 2 | 2 | 2 | 2 |
| 3 | 3 | 3 | 3 | 3 | 3 | 3 | 3 |
| 4 | 4 | 4 | 4 | 4 | 4 | 4 | 4 |
| 5 | 5 | 5 | 5 | 5 | 5 | 5 | 5 |
| 6 | 6 | 6 | 6 | 6 | 6 | 6 | 6 |
| 7 | 7 | 7 | 7 | 7 | 7 | 7 | 7 |
| 8 | 8 | 8 | 8 | 8 | 8 | 8 | 8 |
| 9 | 9 | 9 | 9 | 9 | 9 | 9 | 9 |
| 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 |
| 2 | 2 | 2 | 2 | 2 | 2 | 2 | 2 |
| 3 | 3 | 3 | 3 | 3 | 3 | 3 | 3 |
| 4 | 4 | 4 | 4 | 4 | 4 | 4 | 4 |
| 5 | 5 | 5 | 5 | 5 | 5 | 5 | 5 |
| 6 | 6 | 6 | 6 | 6 | 6 | 6 | 6 |
| 7 | 7 | 7 | 7 | 7 | 7 | 7 | 7 |
| 8 | 8 | 8 | 8 | 8 | 8 | 8 | 8 |
| 9 | 9 | 9 | 9 | 9 | 9 | 9 | 9 |
| 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 |
| 2 | 2 | 2 | 2 | 2 | 2 | 2 | 2 |
| 3 | 3 | 3 | 3 | 3 | 3 | 3 | 3 |
| 4 | 4 | 4 | 4 | 4 | 4 | 4 | 4 |
| 5 | 5 | 5 | 5 | 5 | 5 | 5 | 5 |
| 6 | 6 | 6 | 6 | 6 | 6 | 6 | 6 |
| 7 | 7 | 7 | 7 | 7 | 7 | 7 | 7 |
| 8 | 8 | 8 | 8 | 8 | 8 | 8 | 8 |
| 9 | 9 | 9 | 9 | 9 | 9 | 9 | 9 |
| 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 |
| 2 | 2 | 2 | 2 | 2 | 2 | 2 | 2 |
| 3 | 3 | 3 | 3 | 3 | 3 | 3 | 3 |
| 4 | 4 | 4 | 4 | 4 | 4 | 4 | 4 |
| 5 | 5 | 5 | 5 | 5 | 5 | 5 | 5 |
| 6 | 6 | 6 | 6 | 6 | 6 | 6 | 6 |
| 7 | 7 | 7 | 7 | 7 | 7 | 7 | 7 |
| 8 | 8 | 8 | 8 | 8 | 8 | 8 | 8 |
| 9 | 9 | 9 | 9 | 9 | 9 | 9 | 9 |
| 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 | 0 |
| 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 |
| 2 | 2 | 2 | 2 | 2 | 2 | 2 | 2 |
| 3 | 3 | 3 | 3 | 3 | 3 | 3 | 3 |
| 4 | 4 | 4 | 4 | 4 | 4 | 4 | 4 |
| 5 | 5 | 5 | 5 | 5 | 5 | 5 | 5 |
| 6 | 6 | 6 | 6 | 6 | 6 | 6 | 6 |
| 7 | 7 | 7 | 7 | 7 | 7 | 7 | 7 |
| 8 | 8 | 8 | 8 | 8 | 8 | 8 | 8 |
| 9 | 9 | 9 | 9 | 9</ | | | |

Einerster Teil der Karten des Zwei-Kartensystems, die auf Subskriptionsbasis verkauft werden, ist bereits lieferbar^{12).}

IBM-Karten

In den USA wird gegenwärtig bei einigen Forschungsstellen jenes System bevorzugt, das auf der Verwendung der IBM-Karte basiert.

Bild 4 zeigt eine solche IBM-Karte. Bei ihr wird das Erkenntnisgut durch Lochung der Karte an bestimmten Stellen gespeichert. Jedes Loch wird durch Angabe von Zeilen- und Spaltenzahl eindeutig lokalisiert. Die Spalten sind von 1 bis 80, die Zeilen von 0 bis 9 numeriert. Oberhalb der 0-Zeile befinden sich noch zwei weitere auf der Karte nicht mit Zahlen bedruckte Zeilen, die bei dem verwendeten Code mit X und Y bezeichnet werden. Der Code wurde von *Lester E. Kuentzel*¹³⁾ entwickelt. Auf diesen Karten beträgt die Auflösung $0,1 \mu$ im Intervall von 1μ bis $25,9 \mu$ und 1μ im Intervall von $25,9 \mu$ bis 49μ . Sortiert wird maschinell; in einer Minute können 250 bis 650 Karten sortiert werden.

Ausblick

Eine endgültige Aussage darüber, ob die IBM-Karte oder die beschriebene Randlochkarte die Dokumentationswünsche im Bereich der Ultrarotspektroskopie besser er-

¹²⁾ Der Preis beträgt schätzungsweise pro Karte für die „compound card“ 10 cents (± 2 cents) und für die „bibliography card“ 5 cents. Man kann damit rechnen, daß das Komitee im ersten Jahr seiner Tätigkeit Karten im Werte von \$ 200 bis \$ 250 liefern kann. Bestellungen und Anfragen sind zu richten an: Committee on Infrared Absorption Spectra, *E. Carroll Creitz*, Secretary, National Bureau of Standards, Washington 25, D. C.

¹³⁾ *L. E. Kuentzel*, Wyandotte Chemicals Corporation, Wyandotte, Michigan, USA.

füllt, wäre bei dem gegenwärtigen Stand der Entwicklung verfrüht. Beide Kartentypen haben ihrer Anlage entsprechend Vor- und Nachteile. Die IBM-Karte, mit ihrer größeren Speicherkapazität, ist z. B. zur Berechnung von Korrelationskoeffizienten besonders zu bevorzugen, da mit ihr unter Benutzung der entsprechenden IBM-Maschinen sämtliche vier Grundrechenoperationen durchgeführt werden können. Der Hauptwert der Randlochkarte liegt in einer schnellen Gruppiermöglichkeit der Werte, wobei sehr viel Raum für Eintragungen zur Verfügung steht. Diese Eintragungen ermöglichen es, „latentes“ Erkenntnisgut in die Karte aufzunehmen. So gibt beispielsweise die IBM-Karte keine Auskunft über die Feinstruktur der Banden, während die Randlochkarte mit dem aufgedruckten Diagramm des Spektrums (Rückseite der „compound card“) hierüber eine Information erlaubt. Handelt es sich um reine ja-nein Klassifizierungen, so steht die Arbeitsgeschwindigkeit der Randlochkarte der der IBM-Karte praktisch nicht nach und auch maschinelles reines Auszählen manuell sortierter Stapel ist mit gleicher Geschwindigkeit möglich.

Wir möchten es unterlassen, weitere Vor- und Nachteile beider Kartentypen anzuführen, denn jede Untersuchung dieser Art führt zu dem gleichen Resultat: die Leistungsfähigkeit der Lochkarte und damit ihr Wert als Hilfsmittel der Dokumentation wird entscheidend dadurch bestimmt, in welchem Maße es gelingt, schwierigere experimentelle und geistige Sachverhalte in einsinniger Weise zu erfassen.

Eingeg. am 5. Januar 1953 [A 489]

Zuschriften

Proteinsynthese in Hefezellen

Von Prof. Dr. FRITZ TURBA und HERBERT ESSER
Pharmakologisches Institut der Universität Mainz

Da sich echte Protein-Synthese zuverlässiger als in Gewebeschnitten oder Homogenaten¹⁾ in lebenden Zellen beobachten läßt, suchten wir dafür nach einem geeigneten Versuchsobjekt. Besser als überlebende grüne Blätter²⁾, Grünalgen³⁾ oder Bak-

¹⁾ Zusammenfassung bei *H. Borsook*, Physiol. Rev. 30, 212 [1950].

²⁾ Versucht wurde die Methode der Vakuumfiltration der Ausgangslösung in die Blätter.

³⁾ *M. Calvin* u. *A. A. Benson*, Science [New York] 109, 140 [1949].

terien⁴⁾ bewährten sich in unseren Versuchen Zellen der Hefe *Torulopsis utilis*. Nach geeigneter Umzüchtung⁵⁾ wächst diese mit Acetat als alleiniger Kohlenstoff-Quelle und zeigt eine sehr schnelle Synthese von Eiweiß.

⁴⁾ Essigsäurestoffwechsel in *Escherichia coli*: *C. Cutinelli*, *G. Ehrensvärd*, *L. Reio*, *E. Saluste* u. *R. Stjernholm*, Acta Chem. Scand. 5, 353 [1951].

⁵⁾ *J. Baddiley*, *G. Ehrensvärd*, *R. Johansson*, *L. Reio*, *E. Saluste* u. *R. Stjernholm*, J. biol. Chemistry 183, 771 [1950].

Bild 1
Radioautogramme nach Papirelektropherogrammen von Aminosäuren und Peptiden, die zu verschiedenen Zeiten nach Verabreichung von $\text{CH}_3^{14}\text{COOH}$ an wachsende Torula-Hefezellen entstanden sind. (Die Auftragstellen wurden nachträglich eingezeichnet!)

