

ANGEWANDTE CHEMIE

FORTSETZUNG DER ZEITSCHRIFT »DIE CHEMIE«

HERAUSGEGEBEN VON DER GESELLSCHAFT DEUTSCHER CHEMIKER

82. JAHRGANG 1970

HEFT 15

SEITE 563–642

Kommunikation in der Chemie heute – Probleme und Möglichkeiten

Von Günter Kresze^[*]

In diesem Aufsatz wird über die Problematik und die Möglichkeiten berichtet, heute Ergebnisse und Anschauungen in der Chemie zu vermitteln. Persönliche Mitteilungen sowie Primär- und Sekundärliteratur müssen in Zukunft durch Dokumentations- und Informationsdienste ergänzt werden, die moderne elektronische Datenverarbeitungsanlagen benutzen.

1. Klassische Methoden der Informationsvermittlung in der Chemie

Das Kommunikationsproblem ist in allen Zweigen der Wissenschaft eng verknüpft mit der Entwicklung unseres Denkens: Überall werden heute Denkformen und Zielsetzungen, die aus einer naiv-wissenschaftsorientierten Welt stammen, in ihrer Gültigkeit angezweifelt; Methoden, die früher zur Lösung von Aufgaben ausreichten, erweisen sich jetzt als unzulänglich. Auf dem Gebiet der Kommunikation – speziell in den Naturwissenschaften – sind diese Probleme relativ frühzeitig erkannt worden. In diesem Aufsatz soll versucht werden, einen Überblick über einige der Grundprobleme und die sich abzeichnenden Möglichkeiten zu geben.

Die erste Problem-Kategorie ist die der *großen Zahl*. Nach Schätzungen der National Science Foundation

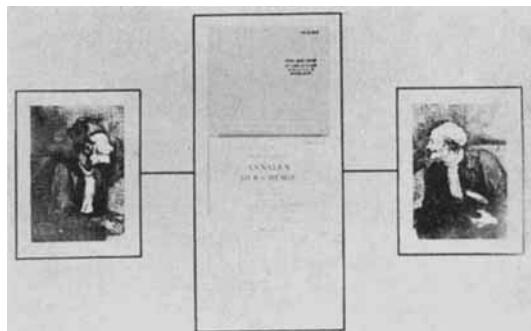


Abb. 2. Die chemische Primärliteratur als Vermittlungsstelle der Kommunikation.

arbeiten zur Zeit auf der Welt 500 000–700 000 Chemiker und Chemieingenieure. Wie nun bestimmt diese Zahl die Kommunikation in der Chemie? Die „natürliche“ Art der Kommunikation auf dem Gebiet ist das Gespräch (Abb. 1), die direkte Mitteilung eines Ergebnisses oder einer Anschauung. Diese Form spielt auch heute eine wesentliche Rolle: Die vielen Tagungen z. B. sind Beweis für die Wichtigkeit, die der mündlichen Kommunikation zuerkannt wird. Voraussetzung dafür, daß mündliche oder schriftliche direkte Diskussion zur Information des Chemikers ausreicht, der sie empfängt, ist, daß er alle auf dem gleichen Gebiet Arbeitenden kennt. In einzelnen forschungsintensiven Gebieten, z. B. der Biochemie, mit definierter „Stoßrichtung“ der Forschung, ist das auch jetzt noch angenähert der Fall. Es ist aber selbstverständlich, daß eine solche Kenntnis auf den allermeisten Gebieten bei der großen Zahl der Chemiker unmöglich ist.

Generell ist die Kommunikation also nur über *Vermittlungsstellen* möglich. Die klassische Form solcher Vermittlung ist die chemische Primärliteratur: Fachzeitschriften, Patentschriften, Monographien (Abb. 2).



Abb. 1. Die „natürliche“ Art der Kommunikation – das Gespräch („Zwei Advokaten“, von H. Daumier. Stedelijk Museum, Amsterdam).

[*] Prof. Dr.-Ing. G. Kresze
Organisch-chemisches Institut der Technischen Hochschule
8 München, Arcisstraße 21

Die Kommunikation wird dadurch indirekter, unpersonlicher – aber überhaupt erst möglich. Prüfen wir anhand der Wünsche der Teilnehmer an dieser Art Kommunikation, wieweit die Primärliteratur ihre Aufgaben heute erfüllen kann! Der Wunsch jedes Autors ist es zunächst, seine Ergebnisse allen interessierten Fachkollegen mitzuteilen; er wünscht eine gezielte Mitteilung. Der Wunsch jedes Lesers muß es sein, *gezielt* und *vollständig* das ihn Interessierende aufzufinden. Diese Wünsche sind in der Chemie besonders ernst zu nehmen: Fremde Ergebnisse bilden ein wesentliches Hilfsmittel bei der eigenen Arbeit und beeinflussen oft genug den weiteren Verlauf dieser Arbeit entscheidend.

Wieweit sind nun heute Fachzeitschriften in der Lage, als Vermittlungsstelle bei der Kommunikation zu dienen? Nach dem „Overview of World Wide Chemical Information Facilities and Resources“ der National Science Foundation beträgt die Gesamtzahl der Fachzeitschriften auf dem Gebiet der Chemie zur Zeit 12000; pro Jahr erscheinen ca. 300000 Zeitschriftenartikel und 50000 Patentschriften. Man kann abschätzen, daß in nur 50 Zeitschriften 25 %, in etwa 250 50 % und in etwa 1300 Zeitschriften 75 % der Veröffentlichungen auf dem Gebiet der Chemie enthalten sind. Es ist ferner selbstverständlich nicht so, daß der einzelne Chemiker, um über sein Interessengebiet möglichst vollständig informiert zu sein, alle – oder auch nur die Mehrzahl – der chemischen Fachzeitschriften lesen muß: Die Zahl wird schon dadurch eingeschränkt, daß viele dieser Zeitschriften vorwiegend Artikel aus engen Spezialgebieten bringen, und sich dieser Trend in der letzten Zeit verstärkt. Trotzdem muß man nur die Zahl der vorhandenen Zeitschriften der entgegenhalten, die nach dem Ergebnis der Fragebogenaktion 1967/68^[*] der Gesellschaft Deutscher Chemiker im Durchschnitt vom Chemiker gelesen wird: Acht Zeitschriften, um einzusehen, daß die Bedingung „Vollständigkeit der Information“ durch das Lesen von Fachzeitschriften allein nicht annähernd erfüllt werden kann. Daher wird seit langem neben Zeitschriften zur Information eine weitere Kommunikationsvermittlung benutzt: Die chemische Sekundärliteratur, Titellisten oder Referateorgane (Abb. 3). Das bedeutet eine weitere Relais-Station in der Kommunikation, und damit eine weitere Entpersönlichung, verbunden mit einer

weiteren zeitlichen Verzögerung. Um so strenger ist zu prüfen, wieweit durch die Einschaltung von Sekundärdiensten wenigstens die Forderung einer gezielten und vollständigen Information erfüllt werden kann. Dabei stoßen wir sofort auf die zweite Kommunikationsaufgabe in der Chemie: das Informationswiederauffinden (Information retrieval) – die *Chemiedokumentation*. Gerade in der Chemie behalten Ergebnisse oft sehr lange ihren Wert. Darstellungsverfahren, Daten über Eigenschaften von Verbindungen und Reaktionen können oft auch dann noch bei der eigenen Arbeit benutzt werden, wenn von ihnen schon vor hundert Jahren berichtet worden ist.

Ein möglichst vollständiges Wiederauffinden aller früheren Ergebnisse ist daher ein Wunsch, der von den Kommunikationsdiensten in der Chemie, neben dem der aktuellen Information, erfüllt werden muß. Dies war die ursprüngliche Aufgabe der Referateorgane, die wie die Handbücher gerade die zusammenfassende und vollständige Suche (Recherche) nach Verbindungen und Sachverhalten mit Hilfe ihrer Register ermöglichen sollten. Damit nun gewährleistet ist, daß jede spätere Recherche vollständig das Erfahrensgut liefert, muß alles Wichtige aus dem Inhalt einer Veröffentlichung durch den Bearbeiter bei einem Referateorgan herausgesucht und wiedergegeben werden. Neben der Fragwürdigkeit, ob dies überhaupt möglich ist, erfordert eine solche „tiefe“ Analyse viel Zeit. Der Versuch, die Dokumentationsaufgabe bei ständig steigendem Anfall an Veröffentlichungen – heute rechnet man mit einer Verdoppelung der chemischen Literatur alle acht bis zehn Jahre – und trotz der nicht in gleichem Maße steigenden Bearbeiterzahl zu erfüllen, führte zu der in der Vergangenheit oft bemängelten Rückständigkeit der Referateorgane und damit zu ihrer Unbrauchbarkeit als Mittel aktueller Information.

Ein Weg dazu, die Sekundärliteratur als Vermittlungsstelle bei der Kommunikation in der Chemie wirksam einzusetzen, besteht im Verzicht auf die Erfüllung der Dokumentationsaufgaben^[1].

Zusammenfassend: Wir haben gesehen, daß die Zunahme des zu kommunizierenden Materials nicht nur die Vollständigkeit der Kommunikation vermindert, sondern auch *qualitativ* die benutzten Kommunikationsmittel unfähig macht, ihre Aufgaben in der aktuellen Information zu erfüllen. Dazu kommt noch das grundsätzliche Problem, daß das Dazwischenstecken von immer mehr Kommunikationsvermittlern verfälschend wirken kann und verlangsamt wirken muß.

Dann liegt aber der Schluß nahe, auch unter Verzicht auf herkömmliche Gewohnheiten neue Methoden zur aktuellen Information zu suchen, die bestimmt noch entpersonalisierter sind als die bisher benutzten, jedoch mit einiger Wahrscheinlichkeit die prinzipiellen Forderungen nach Schnelligkeit der Informationsüber-

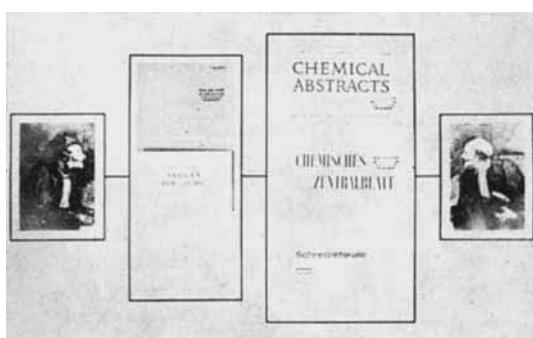


Abb. 3. Die chemische Sekundärliteratur als Vermittlungsstelle der Kommunikation.

[*] Zusammenfassung der Auswertung: Ch. Weiske, Nachr. Chem. Techn. 18, 250 (1970).

[1] Derzeitige Versuche in dieser Richtung s. Ch. Weiske, Angew. Chem. 82, 569 (1970); Angew. Chem. internat. Edit. 9, Nr. 8 (1970).

mittlung sowie Gezieltheit und Vollständigkeit der Information erfüllen können. Solche Methoden werden in Abschnitt 4 vorgestellt.

2. Anforderungen an ein Kommunikationssystem in der Chemie

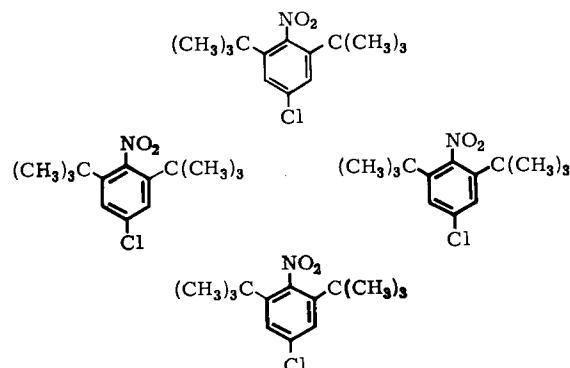
Während durch die große Zahl der Mitteilungen vor allem Schnelligkeit und Vollständigkeit der Kommunikation beeinträchtigt werden, sind durch die zweite Problemgruppe, die Änderung der Fragestellungen, vor allem die Gezieltheit und die Vollständigkeit der Information gefährdet. Ob bei der aktuellen Information oder beim Wiederfinden (retrospektive Recherche) – gefragt wurde und wird in der Chemie nach Stoffen, Strukturen und Eigenschaften. Die Bedeutung dieser Fragekategorien hat sich jedoch gerade in den letzten Jahren als Folge der Entwicklung der Chemie, vom Empirischen zu Deduktiven hin, geändert. Ein Blick auf das Ergebnis der GDCh-Fragebogenaktion zeigt das (Tabelle 1).

Tabelle 1. Wonach wird in der Chemiedokumentation gesucht? (Auswertung der Fragebogenaktion der Gesellschaft Deutscher Chemiker).

Fragen nach	Antworten (%)
1. Einzelverbindungen	25
2. Partialstrukturen	23
3. Reaktionen	22
4. Eigenschaften	7
5. Anwendungen	5
6. Kombinationen von 1–5	17

Neben einzelnen Verbindungen werden in fast gleichem Ausmaß Auskünfte über Verbindungsklassen mit einem gemeinsamen Strukturelement, „Partialstrukturen“, verlangt; Eigenschaften oder Anwendungen alleine – so wichtig die Suche nach ihnen sein mag! – werden viel seltener gefragt als zum Beispiel die Kombination von Eigenschaften und Strukturcharakteristika. Als solche Kombinationsfragestellungen sind auch die Recherchen nach Reaktionen (Verknüpfung der Strukturen von Ausgangsmaterial und Endprodukt) anzusehen. Eine moderne Chemiedokumentation muß solche Fragen beantworten können. Nun liegt jeder Dokumentation ein Ordnungsprinzip, eine Systematisierung zugrunde: Für chemische Verbindungen sind in den Handbüchern auch heute noch gültige Ordnungssysteme geschaffen worden. Sie erlauben auch das Zusammenfassen von Verbindungen mit gemeinsamen Strukturelementen, so weit diese ihrem Systematisierungssystem entsprechen. Wenn man sich aber einmal klar macht, wieviele mögliche Zusammenfassungen, wieviele Partialstrukturen bei einer relativ einfachen chemischen Verbindung – z.B. 1,3-Di-tert.-butyl-5-chlor-2-nitrobenzol – bei einer späteren Recherche interessant sein können (Chlornitrobenzolderivate für denjenigen, der an S_N-Reaktionen am aromatischen Kern interessiert ist; 1,2,3,5-tetrasubstituierte Benzole für den Molekülspektroskopiker; o-tert. Butylnitrobenzole vielleicht für den Süßstoffchemiker) – dann wird deutlich, daß kein noch so perfektes lineares Anordnungssystem in

einem Handbuch oder Register *alle* denkbaren Gruppenbildungen ermöglichen kann: Es muß notwendigerweise monodimensional sein, während die heutigen Fragestellungen multidimensionale Suchmöglichkeiten verlangen.



Noch schlimmer steht es mit den Sachverhalten: Die Register von Monographien sind auch heute meist eine Kompilation der aus dem Text herausgesuchten, als wesentlich angesehenen Wörter, deren einziges Ordnungsprinzip das Alphabet ist. Es wird vom Benutzer erwartet, daß er für den Begriff, den er sucht, *das Wort* findet, das dafür im Text benutzt worden ist – oder an Wörter mit gleichem oder ähnlichem Begriffsinhalt denkt. Bei den Registern der Referateorgane besteht eine gewisse Normung: Für Synonyma, Wörter gleicher Bedeutung, sind Hinweise gegeben. Sie stellen Sammlungen von Sachverhaltsbezeichnungen dar (einen „Thesaurus“). Trotzdem besteht schon bei der gezielten Suche nach einem Sachverhalt – einer Eigenschaft, einer Verwendung, – bei Benutzung der herkömmlichen Dokumentationshilfsmittel, vor allem der Register, die Gefahr des Informationsverlustes. Darüber hinaus verbirgt sich aber bei vielen Fragestellungen nach Sachverhalten hinter der speziellen Formulierung der Wunsch nach allgemeiner Information: Es wird zwar z.B. speziell nach der antipyretischen Wirkung einer Substanz gefragt, im weiteren Sinne interessieren gegebenenfalls aber auch Erfahrungen über andere pharmazeutische Verwendungen. Wie bei den chemischen Strukturen muß die Dokumentation Zusammenfassungen von Sachverhalten erlauben. Systeme zur Ordnung der Sachverhaltsbezeichnungen, Klassifikationen, die es möglich machen, wahlweise allgemeinere und speziellere Begriffe bei der Fragestellung zu benutzen, werden in der Chemie erst seit relativ kurzer Zeit bearbeitet. Solche Ordnungssysteme sind jedoch Voraussetzung für eine gezielte und vollständige Recherche. Und wieder: Solche Ordnungssysteme müssen multidimensional aufgebaut sein; die herkömmlichen Dokumentationsverfahren können diese Forderung nicht erfüllen.

Schließlich lösen konventionelle Methoden auch nicht das Problem der Beantwortung von Kombinationsfragen. Auch hier, wie bei den Recherchen nach Partialstrukturen, ist prinzipiell mit einem monodimensionalen Register die Frage nicht zu beantworten.

Zusammenfassend: Mit den konventionellen Methoden der Chemiedokumentation läßt sich nur ein Teil

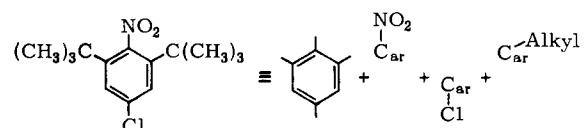
der Fragen beantworten, die heute wichtig sind. Dieser Unzulänglichkeiten ist man sich in den letzten zwanzig Jahren bewußt geworden. Das hat zu scharfer Kritik an den vorhandenen Kommunikationsorganen geführt, aber auch zu Versuchen, eine angemessene Information und Dokumentation in der Chemie zu entwickeln.

Generell ist sicher, daß die Lösung der geschilderten Probleme ein Neu-Durchdenken der Ordnungssysteme erfordert, die eine Vermittlung der den Bedürfnissen angepaßten Kommunikation erlauben^[2]. Diese fachliche Aufgabe ist nur bei Benutzung neuer *technischer* Verfahren zu lösen.

3. Computer-gerechte Beschreibung von Strukturen organischer Verbindungen

Es traf sich gut, daß zur gleichen Zeit, als das Kommunikationsproblem in der Chemie akut wurde, elektronische Datenverarbeitungsanlagen entwickelt worden sind, die sich für die Lösung des Problems sowohl der großen Zahl als auch der polydimensionalen Recherche anbieten, daß also die technischen Möglichkeiten zur Lösung des Problems bereitstanden. Nun ist es freilich nicht damit getan, die zu übermittelnden Informationen in herkömmlicher Weise einfach in einen Computer einzuspeichern und zu hoffen, daß eine Befragung dann auch Erfolg hat. Vielmehr mußten die Informationen so umgeformt werden, daß sie später „computer-gerecht“ recherchiert werden können. Das bedeutet die Schaffung einer neuen Sprache zur Beschreibung chemischer Strukturen und Sachverhalte, die Erarbeitung von Ordnungssystemen für Strukturen und Sachverhalte, die die Möglichkeiten der Datenverarbeitungsanlagen zur Kombinationsbefragung auszuschöpfen erlauben – in summa ein Umdenken und Durchdenken der Bedeutung chemischer Aussagen. Am Beispiel der Beschreibung von Strukturen organischer Verbindungen sollen kurz die Wege geschildert werden, die dazu begangen worden sind.

Der eine Weg beruhte auf dem Gedanken, die in einer Strukturformel denkbaren Strukturfragmente durch Codezeichen zu kennzeichnen und die Summe dieser Codezeichen als Beschreibung der Verbindung zu benutzen. In solchen „Fragmentcodes“ wird also z. B. angegeben, daß die Verbindung unseres Beispiels einen Benzolkern, in 1,2,3,5-Stellung substituiert, sowie eine



an ein aromatisches C-Atom gebundene Nitrogruppe, ein genauso gebundenes Chloratom und eine (oder auch mehrere) Alkylgruppen am aromatischen Kern enthält.

[2] Neu-Durchdenken der Aufgaben und der Methoden der Kommunikation in der Chemie s. R. Fugmann, Angew. Chem. 82, 574 (1970); Angew. Chem. internat. Edit. 9, Nr. 8 (1970).

Es sind in den letzten Jahren viele Vorschläge für solche Fragmentcodes gemacht worden; sie erlauben – im Rahmen der im Code aufgeführten Fragmente – die vorhin geforderte Suche nach Partialstrukturen. Einer der ausgereiftesten Codes dieser Art, das GREMAS-System, wird in einer europäischen industriellen Chemiedokumentation, der IDC (Internationale Dokumentationsgesellschaft für Chemie mbH, Frankfurt) verwendet^[3]. Der Vorteil solcher Fragmentcodes besteht in einer dem Chemiker geläufigen Beschreibung von Strukturen, die bei der Recherche klare Fragestellungen zuläßt, welche mit Datenverarbeitungsanlagen schnell und daher auch bei großem Material billig beantwortet werden können. Der Nachteil liegt darin, daß die Übersetzung einer Strukturformel in eine solche Beschreibung, die „Verschlüsselung“, eine intellektuelle Arbeit ist, die von Fachleuten mit sicherer Kenntnis der oft recht komplizierten Verschlüsselungsvorschriften geleistet werden muß – ein bei den großen zu bearbeitenden Materialmengen sehr aufwendiger und teurer Prozeß.

Die zweite prinzipielle Möglichkeit zur Beschreibung chemischer Strukturen ist die abstrakte Aufzählung der im Molekül vorhandenen Atome in ihrer Verknüpfung: Die „Topologie“. Das Prinzipielle des Arbeitsverfahrens zeigt Abbildung 4.

1	4	2	000
2	1	1	357
3	4	2	000
4	2	5	900
5	1	8	264
6	4	5	000
a)	7	4	2
	8	4	5
	9	4	000

b)

Abb. 4. Die Vorschrift lautet:

- a) Zeichnen Sie die Strukturformel auf und numerieren Sie die Atome in beliebiger Reihenfolge (Beispiel: Äthanol).
- b) Schreiben Sie die „Ordnungszahlen“ – die den Atomen zugewiesenen Nummern – untereinander, daneben jeweils die Elementarsymbole – im Beispiel die Ziffern 1 für Kohlenstoff, 2 für Sauerstoff und 4 für Wasserstoff, und daneben wieder jeweils die Ordnungszahlen der Ligandenatome, die an das betreffende Atom gebunden sind.

Das Ergebnis ist eine Zahlenfolge, eine Matrix. Quasimathematisch ist diese Strukturbeschreibung einem „Graphen“ äquivalent, einem System aus Strecken – den Bindungen – und Knoten – den Atomen. Diese Äquivalenz macht eine Verarbeitung der Beschreibung auf elektronischen Rechenmaschinen besonders attraktiv. Bei der topologischen Strukturbeschreibung^[4] ist keine Kenntnis komplizierter Verschlüsselungsvorschriften nötig, ja es ist heute sogar möglich, den Prozeß mit Formelschreibmaschinen oder Formellesemaschinen weitgehend zu automatisieren. Die Eingabe ist also bei der Topologie sehr einfach und billig – auch bei großen Materialmengen. Dafür ist die Recherche – das Wiederfinden der Information – oft

[3] Zum IDC-System s. M. A. Lobeck, Angew. Chem. 82, 598 (1970); Angew. Chem. internat. Edit. 9, Nr. 8 (1970).

[4] Zur topologischen Strukturbeschreibung s. E. Meyer, Angew. Chem. 82, 605 (1970); Angew. Chem. internat. Edit. 9, Nr. 8 (1970).

recht kompliziert. Die Partialstrukturen, also Verbindungsgruppen, die den Frageinhalt darstellen, müssen in der Datenverarbeitungsanlage aus vielen Einzelangaben zusammengesucht werden. Die Recherche ist aufwendiger und teurer als bei Fragmentcodes. Der IDC ist es nun gelungen, die beiden Systeme zur Beschreibung chemischer Strukturen zu kombinieren: Einer topologischen Eingabe folgt die einmalige maschinelle Umwandlung in den ausgereiften Fragmentcode, das GREMAS-System. Bei den Recherchen wird in den meisten Fällen nur dieser Code befragt. So ist auch bei großen Datenmengen – z. Z. sind über 800000 Strukturen eingespeichert – eine schnelle und billige Befragung möglich.

Die Entwicklung bei der Beschreibung der Struktur einer chemischen Verbindung – vom Namen über die Angabe der Fragmente zur Topologie – ist ein Abstraktionsprozeß, eine Entwicklung auch der Auffassungen von der Chemie. Ein analoger Abstraktionsprozeß – typischerweise wieder unter Verwendung mathematischer, graphentheoretischer Verfahren – ist bei der Ausarbeitung der Sachverhaltsverschlüsse lungen zur Verarbeitung in elektronischen Rechenanlagen zu beobachten. Hier war die Aufgabe noch viel schwieriger: Viele, oft unzureichend oder verschiedenen definierte Begriffe, die zudem in ihrer Bedeutung zeitabhängig sind, waren in ein logisches System einzutragen^[5].

Zusammenfassend: Mit elektronischen Datenverarbeitungsanlagen und bei Verwendung von Ordnungs- und Beschreibungssystemen für chemische Strukturen und für Sachverhalte ist es technisch möglich, die eingangs geschilderten Schwierigkeiten zu überwinden. Das Zutreffende, als Information Gewünschte kann rasch und sicher aus großen Materialmengen herausgefunden werden; die Fragen, die außer den sogenannten „klassischen“ heute Bedeutung besitzen – nach Verbindungsgruppen beliebiger Art, nach Kombinationen von Strukturen und Sachverhalten – sind beantwortbar.

Auf eine Möglichkeit soll speziell hingewiesen werden: Solche Recherchen können so formuliert werden, daß sie den gesamten Interessenbereich eines einzelnen, sein „Interessenprofil“, abdecken. Werden alle Veröffentlichungen auf einem Gebiet gleich beim Erscheinen in eine Datenverarbeitungsanlage eingegeben, so kann durch sofortige Recherche nach den Interessenprofilen den Teilnehmern eines solchen Kommunikationssystems aktuelle Information geliefert werden – und zwar individuell nur das Interessierende, selektiv und gezielt. Das ist das Prinzip der „Selective Dissemination of Information“, des „SDI“, wie er an vielen Stellen in der industriellen Chemiedokumentation schon verwirklicht ist.

4. Informations- und Dokumentationsdienste in Gegenwart und Zukunft

Gerade die neuen technischen und fachlichen Kommunikationsmöglichkeiten erzwingen nun ein Umdenken auch in anderer Hinsicht. Dazu soll kurz über

eine Problematik berichtet werden, die nicht primär mit der Kommunikation selbst, sondern vielmehr mit dem Apparat der Vermittlung von Informationen zu tun hat. Die Diversität der Interessen, die unterschiedlichen Aufgaben bei aktueller Information und Dokumentation, haben neben anderen Gründen dazu geführt, daß zur Zeit zahlreiche allgemeine oder spezialisierte Informations- und Dokumentationsdienste nebeneinander existieren. Jede dieser Stellen wertet die Primärliteratur aus, analysiert sie: Für viele Veröffentlichungen wird diese intellektuelle Arbeit zweimal, dreimal oder noch öfter geleistet. Das hat vor allem bei den speziellen Diensten den Vorteil, daß sie den Wünschen ihres Bezieherkreises weitgehend angepaßt sein können. Aufs Ganze gesehen bedeutet es eine Verschwendug von Arbeitskraft und Geld. Wenn nun die Informationsvermittlung in herkömmlicher Weise sowieso – jedenfalls bei kritischem Durchdenken – sich als unzureichend erweist, dann müssen die Informationsdienste früher oder später zur Verwendung der Methoden übergehen, die eine schnelle, gezielte und vollständige Information erlauben; d. h. sie müssen maschinelle Dokumentation betreiben. Das bedeutet aber, daß der finanzielle Aufwand zur Herstellung der Informations- und Dokumentationsdienste um Größenordnung steigt. Und diese Verteuerung wird potenziert beim Nebeneinanderarbeiten vieler Dienste, beim Mehrfachbearbeiten desselben Materials. Soll nicht die sachlich erforderliche Umstellung auf moderne Arbeitsmethoden durch finanzielle Gründe verhindert werden, so muß die Kommunikationsvermittlung anders organisiert werden.

Diese Umorganisation wird seit längerer Zeit diskutiert. Zwei Begriffe tauchen dabei immer wieder auf: der der Informationszentrale und der eines Informationsnetzes, „information network“. Prinzipiell kann man sich vorstellen, daß die gesamte Primärliteratur in der Chemie in einer einzigen Zentrale ausgewertet wird: Diese Zentrale gibt dann – im Idealfall für alle Chemiker – Informationsdienste oder – durch Recherchen an sofort bei der Auswertung eingespeicherten Materialsammlungen – gezielte Informationen, Hinweise allein auf das dem Interessenprofil des einzelnen Chemikers entsprechende Material, also einen SDI, heraus.

Das in der Zentrale eingespeicherte Material dient gleichzeitig zu späteren zusammenfassenden Recherchen; es ist der Grundstock der Dokumentation. Es hat sich in der letzten Zeit die Einsicht durchgesetzt, daß eine solche weltweite Zentrale wohl kaum zu realisieren sein dürfte. Viele Stellen, die sich mit dem Problem der Organisation der Dokumentation in den Naturwissenschaften, in der Technik und speziell in der Chemie befaßt haben, empfehlen stattdessen ein Zusammengehen der existierenden Dienste. Ein solches Zusammengehen wird ebenfalls durch die Verwendung maschineller Methoden technisch sehr er-

[5] Graphisches Verfahren zur Wiedergabe von Begriffsverknüpfungen in der mechanisierten Chemiedokumentation s. R. Fugmann, H. Nickelsen, I. Nickelsen u. J. Winter, Angew. Chem. 82, 611 (1970); Angew. Chem. internat. Edit. 9, Nr. 8 (1970).

leichtert: Ein Austausch von Informationsmaterial auf der Grundlage von Computerbändern ist weitgehend sprachfrei (oder relativ leicht zu übersetzen) und kann leichter erfolgen als z.B. der Austausch von Referaten – vorausgesetzt, daß man sich auf *ein System* einigt. Im kleineren Kreis ist solche Zusammenarbeit schon vielfach verwirklicht. So haben sich große europäische Firmen in der IDC zusammengetan, um gemeinsam maschinelle Dokumentation zunächst auf dem Gebiet der niedermolekularen organischen Chemie zu betreiben. Auch bei den Diensten, die der chemischen Allgemeinheit zugänglich sind, bahnt sich eine solche Zusammenarbeit an. Ein erster Schritt zu einer solchen Zusammenarbeit war die Vereinbarung zwischen der American Chemical Society und der British Chemical Society, in der Absprachen über gemeinsame Bearbeitung der Primärliteratur und die Schaffung von nationalen Zentralen, die maschinelle Recherchen vornehmen können, getroffen worden sind. Eine ähnliche Vereinbarung wurde 1969 zwischen der American Chemical Society und der Gesellschaft Deutscher Chemiker geschlossen. Es ist zu hoffen, daß dies der Beginn einer modernen, den heutigen Aufgaben gewachsenen weltweiten Chemiedokumentation ist.

Ein solches zukünftiges Informationsnetz in der Chemie könnte z.B. so aussehen: Zu den Kommunikationsmöglichkeiten durch Vorträge, Tagungen und Fachzeitschriften tritt die Information durch spezielle Schnellreferatdienste, die – von der bisher den Referateorganen zukommenden Dokumentationsaufgabe entlastet – jeweils über die Primärliteratur bestimmter Fachgebiete schnell und gezielt berichten. Durch die Verwendung maschineller Hilfsmittel bei der Herstellung dieser Dienste ist es möglich, die Referatehefte jeweils durch Register zu ergänzen und als Abonnementsauftrag dem einzelnen Chemiker die ihn speziell interessierenden Arbeiten laufend anzuzeigen, also einen SDI anzubieten.

Abgetrennt von der aktuellen Information wird es wahrscheinlich nur *einen* allgemeinen Chemiedokumentationsdienst geben, der in internationaler Zusammenarbeit hergestellt wird. Der Inhalt dieser Dokumentation ist maschinell recherchierbar; für solche Recherchen werden Gebiets-Zentralen eingerichtet werden. Die Gesellschaft Deutscher Chemiker plant zusammen mit anderen deutschen wissenschaftlichen

Gesellschaften und Dokumentationsunternehmen den Aufbau einer solchen Zentrale mit staatlicher Unterstützung.

Für den einzelnen Chemiker bedeutet das sicherlich eine Erweiterung seiner Informationsmöglichkeiten und zum Teil eine Änderung seiner Informationsgewohnheiten. Die aktuelle Unterrichtung wird in Zukunft neben dem Lesen von Fachzeitschriften und speziellen Informationsdiensten auch mit Hilfe eines SDI erfolgen können. An die Stelle der zusammenfassenden Literatursuche in der Bibliothek wird oft ein Recherchierauftrag an die Dokumentationszentrale mit Datenverarbeitungsanlage treten.

Ob eine solche Umstellung gelingt, hängt primär von uns allen ab. Auch das beste, technisch vollkommene System nützt nichts, wenn diejenigen, für die es da ist, es nicht – oder nicht ausreichend – benutzen: Eine bedauernde Feststellung, die in der Dokumentation allgemein oft gemacht worden ist. Damit aber der einzelne auch zufrieden die Informationsmöglichkeiten nutzen kann, muß er durch sie seine Wünsche in vernünftigem Rahmen erfüllt sehen. Dies ist auch ein Kommunikationsproblem: Des Kontaktes zwischen denjenigen, die Information- und Dokumentationsdienste herstellen, und denjenigen, die sie benutzen. Gerade in der nächsten Zeit ist ein aktives Interesse durch Kritik, durch Wünsche, aber vor allem auch durch Erproben der Benutzung lebenswichtig für das Gelingen der sachlich notwendigen Umstellung der Chemiedokumentation.

Auch in anderer Hinsicht ist dieses aktive Interesse wichtig: Voraussetzung für die Anwendung einer Methode ist deren Kenntnis. Gerade der junge Chemiker, der in die Industrie geht, sollte wissen, welche Möglichkeiten ihm zu seiner Information zur Verfügung stehen. Nicht jeder muß die Einzelheiten der maschinellen Verfahren kennen, denn in der Praxis wird diese Aufgabe doch von Fachleuten übernommen, für die allerdings auch Nachwuchs – und relativ viel Nachwuchs – vorhanden sein muß. Das bedeutet nicht, daß an den Hochschulen spezielle Lehrstühle für Dokumentation eingerichtet werden müßten. In den USA gibt es Kurse zur Vermittlung der Kenntnisse über die Informationsmöglichkeiten und die Prinzipien der maschinellen Methoden. Auch bei uns werden solche Kurse vorbereitet.

Eingegangen am 18. März 1970 [A 771]