

Ist kritische Sichtung und Bewertung naturwissenschaftlicher Untersuchungsergebnisse ohne Informationsverlust möglich?

Von Reiner Luckenbach, Reinhard Ecker und Josef Sunkel^[*]

Professor Leopold Horner zum 70. Geburtstag gewidmet

Die Frage der Überschrift zielt auf die wissenschaftlich-kritische Bewertung von Informationen als Verfahren zur Auswahl aus einer rasch anwachsenden Menge von Ergebnissen – hier zum Beispiel der Organischen Chemie – und damit als ein Verfahren zur Bewältigung der von der Primärliteratur gebotenen Datenflut durch die Sekundärliteratur. Die hierzu vom Beilstein-Institut aufgrund 100jähriger Erfahrung ausgearbeiteten und erprobten Maßstäbe für die kritische, verlustfreie Bewertung werden diskutiert. An einigen Beispielen wird der Umfang der somit möglichen Datenreduktion demonstriert.

1. Einleitung

Eine der tragenden Säulen der internationalen Chemie-Dokumentation, Beilsteins Handbuch der Organischen Chemie^{[1-3][**]}, besteht jetzt seit 100 Jahren. Die prinzipielle Zielsetzung dieses Werkes war und ist, seinem Benutzer ein von Unrichtigem und Unwichtigem befreites, gehaltvolles „Konzentrat“ der Primärliteratur^[**] als Werkzeug für seine tagtägliche Forschungsarbeit zur Hand zu geben. Das Erreichen dieses Ziels ist nur dann möglich, wenn die in der chemischen Primärliteratur niedergelegten Befunde einer wissenschaftlich-kritischen Wertung unterzogen, d. h. auf allgemeine Stichhaltigkeit und gegenseitige Verträglichkeit geprüft werden. Dabei ist sicherzustellen, daß die infolge dieser kritisch auswählenden Bearbeitung resultierende Datenreduktion für den Benutzer nicht mit einem Verlust von Informationen verbunden ist.

Bevor allgemeine und spezielle Bedingungen für das Erreichen dieses Ziels erörtert werden, sei zunächst kurz die gegenwärtige Situation des „Informationsverbrauchers“ betrachtet.

2. Zur Situation des informationssuchenden Wissenschaftlers heute

Der Prozeß der Kommunikation zwischen den Wissenschaftlern – eine der grundlegenden Voraussetzungen für jede geistige Arbeit – wird in zunehmendem Maße durch die noch immer ansteigende Informationsflut beeinflusst. Es wird zu einer erheblichen Belastung, wenn es dem einzelnen Wissenschaftler weniger und weniger möglich ist, aus der Flut der vorhandenen Informationen die für ihn relevanten auszuwählen.

Das Anschwellen dieser Flut läßt sich durch die Zahl der jährlich in Chemical Abstracts referierten Publikationen vor Augen führen (Tabelle 1).

[*] Prof. Dr. R. Luckenbach, Dr. R. Ecker, Dr. J. Sunkel
Beilstein-Institut für Literatur der Organischen Chemie
Varrentrappstraße 40-42, D-6000 Frankfurt am Main 90

[**] Zur Terminologie des Begriffs „Handbuch“ und seiner im englischen Sprachgebrauch üblichen Äquivalente sowie der Begriffe „Primär- und Sekundärliteratur“ vgl. [4].

Appelle, weniger zu veröffentlichen sowie nicht weiterhin immer neue Zeitschriften zu gründen, verhallen offensichtlich ohne Resonanz. Viele Wissenschaftler gingen deshalb schon vor einiger Zeit dazu über, bei ihrem Literatur-



Abb. 1. Aus *Der Leitende Angestellte* 1978 (7), 14: „Er starb an einer Überdosis Fakten...“.

studium nur noch die jeweils aktuellsten Informationen aufzunehmen und zu berücksichtigen. Dies hatte zur Folge, daß es neben dem Ignorieren von wertvollen älteren Informationen zu zahlreichen Doppel- und Mehrfachveröffentlichungen, zum Teil über schon längst bekannte Tatsachen, kam. Die Disziplin „Dokumentation“, die sich wissenschaftlich intensiv mit der Problematik dieser Entwicklung beschäftigte, glaubte dann, im Forcieren der elektronischen Datenverarbeitung (EDV) einen Ausweg gefunden zu haben. Bereits heute jedoch zeigt sich, daß das kritiklose Speichern jedweder Information erneut in eine Sackgasse führt: Der Ballastanteil bei Recherchen nimmt ständig zu; der Endbenutzer ist genötigt, aus einer großen Zahl ballastbeladener Informationen (Mehrfachveröffentlichungen, Ignorieren längst aufgedeckter Irrtümer etc.) die für ihn relevanten Informationen mit großem Zeitaufwand

Tabelle 1. Zahl der Referate in Chemical Abstracts [5].

Jahr	1909	1919	1929	1939	1949	1959	1969	1979
Zahl der Referate in diesem Jahr	15 459	15 240	48 293	67 108	53 441	127 196	252 320	436 887
Gesamtzahl der Referate bis zu diesem Jahr	42 475	236 796	530 883	1 152 697	1 603 461	2 478 814	4 435 451	8 068 661

auszuwählen. Da dieses kritische Sichten für eine bestimmte Problemstellung von jedem Fragestellenden immer wieder aufs neue durchgeführt werden muß, bedeutet solches Vorgehen einen Verstoß gegen jede Informationsökonomie.

Es erscheint daher sinnvoll und rationell, die Befreiung vom Ballast nicht jedem einzelnen Endbenutzer zuzumuten, sondern ihm die gesuchte Information erst nach kritischer Sichtung und Bewertung durch eine kompetente „Wissensbewertungsstelle“ auszuhändigen – eine Forderung, die bereits vor einigen Jahren mehrfach erhoben wurde^[6], von den großen chemischen Handbüchern allerdings schon seit einem Jahrhundert und länger angenommen und erfüllt wird. Neuere Versuche zur Verwirklichung dieser Forderung scheiterten bisher meist an den erforderlichen hohen Investitionskosten sowie am Problem der gleichzeitigen Vermeidung von Informationsverlusten.

Unter dem soeben verwendeten Begriff „kritische Sichtung und Bewertung“ soll die kompetente Beurteilung einer Information bezüglich ihrer Stichhaltigkeit (Vereinbarkeit mit dem allgemeinen Fachwissen und analogen Sachverhaltsangaben), ihrer Neuheit sowie ihrer allgemeinen wissenschaftlichen Bedeutung verstanden werden.

Zurückgreifend auf Erfahrungen bei der Erstellung des Beilsteinschen Handbuchs soll gezeigt werden, daß es unter bestimmten Voraussetzungen möglich ist, mittels dieser wissenschaftlich-kritischen Sichtung und Bewertung einen entscheidenden Fortschritt in der Informationsökonomie und in der Informationsbereitstellung zu erzielen.

3. Kritische Sichtung in der Wissenschaft

Kritische Sichtung und Auswahl von Informationen nach Qualität und Nützlichkeit sind allgemeine Reaktionen des menschlichen Geistes gegenüber der täglich auf ihn einwirkenden Informationsflut. Auch wissenschaftliche Arbeiten durchlaufen üblicherweise mehrere Stufen kritischer Sichtung.

Ehe ein Ergebnis der Allgemeinheit zur Verfügung steht, werden zumeist schon vom Entdecker oder Erfinder und seiner Arbeitsgruppe unbedeutende, unsichere oder fragwürdige Resultate zurückgehalten, weil der Aufwand für deren Publikation nicht gerechtfertigt erscheint bzw. weitere Untersuchungen erforderlich wären.

Dieser mehr „subjektiv“ geprägten Prüfung folgt als nächster Schritt eine neutrale Begutachtung von Inhalt und Form des zur Veröffentlichung vorgesehenen Manuskripts oder der Patentanmeldung durch Redakteur und Berater einer Fachzeitschrift bzw. durch den Patentanwalt. Die kritische Beurteilung von Beiträgen durch die Herausgeber von Fachzeitschriften hat im Bereich der Chemie eine lange Tradition; als Beispiel sei auf die Tätigkeit *Justus von Liebig*s bei der Herausgabe „seiner“ *Annalen der*

Chemie hingewiesen^[7]. Im Jahre 1871 war es *Friedrich Konrad Beilstein* selbst, der *Emil Erlenmeyer* in einem Brief aufforderte, sich als Kritiker der den Zeitschriften immer zahlreicher eingereichten Arbeiten zu betätigen: „... Sie haben nun die nötige Ruhe gewonnen, um irgendeinem Bösewicht – nicht über Hals und Kopf wie früher – sondern mit dem erforderlichen Behagen, Sammlung, unter langsamem Anrauchen einer Zigarre, das Fell über die Ohren zu ziehen...“^[8]. Doch auch heutzutage wird die Manuskriptbeurteilung durch Redakteure vielfach streng gehandhabt. So lehnten beispielsweise die Chemischen Berichte im Jahre 1979 rund 17% der eingereichten Manuskripte ab und gaben fast 50% zur Umarbeitung (und Kürzung) an die Autoren zurück^[9]. Obwohl nicht wenige der abgelehnten Manuskripte oder Manuskriptteile schließlich in anderen Fachzeitschriften erscheinen, lassen diese Zahlen erkennen, in welchem Ausmaß potentieller Recherche-Ballast schon vor der Veröffentlichung ausgeschieden wird^[1].

Liegen die wissenschaftlichen Informationen nun in Form einer Primärveröffentlichung vor, so werden sie dann von der Sekundärliteratur erfaßt. Aufgabe der Sekundärliteratur ist die Dokumentation, das „Erfassen, Sammeln, Aufschließen, Ordnen und auswählbar Speichern“^[10] der in der Primärliteratur enthaltenen Informationen.

Der große Bereich der Sekundärliteratur soll im folgenden in „die Primärliteratur *auswählende* Sekundärliteratur“ und in „die Primärliteratur *vollständig berücksichtigende* Sekundärliteratur“ unterteilt werden.

Die „auswählende Sekundärliteratur“ will den Benutzer exemplarisch informieren, indem sie das wissenschaftliche Material in Gruppen ordnet und gemeinsame Eigenschaften am Einzelbeispiel darstellt. Der Benutzer muß ein eventuelles Risiko des Analogieschlusses auf seinen Spezialfall selbst tragen. Als Beispiele für „auswählende Sekundärliteratur“ seien genannt: Übersichtsartikel, Monographien, Lehrbücher.

Aufgabe der „vollständigen Sekundärliteratur“ ist es, den Benutzer mit allen Informationen des von ihr bearbeiteten Wissenschaftsbereiches zu versorgen. Sie führt den Benutzer zum Einzelfall und liefert ihm dazu das gesamte vorhandene Wissen.

Zur „vollständigen Sekundärliteratur“ gehören neben den bewährten Referate-Organen (die eine vollständige, weitgehend unkritische, fortlaufende Auflistung und Registrierung des Inhalts der Primärliteratur betreiben: Katalog alles bekannten Wissens) auch die wissenschaftlichen Handbücher.

[*] Sicherlich wäre es ungerechtfertigt, die Tatsache der Nicht-Publizierung oder Nicht-Publizierbarkeit allein als Maßstab für die Bedeutung eines Ergebnisses wissenschaftlicher Untersuchungen anzusehen, da oftmals auch persönliche, politische, militärische oder firmenpolitische Gründe gerade die Veröffentlichung bedeutender Ergebnisse blockieren.

Diese Handbücher können unter bestimmten Voraussetzungen so konzipiert werden, daß nicht nur die Primär-Informationen vollständig vermittelt werden, sondern auch

- Mehrfachveröffentlichungen gleichen Inhalts und altbekannte Befunde ausgeschieden werden,
- Berichtigungen früherer Ergebnisse unmittelbar berücksichtigt werden,
- widersprüchliche Angaben zu ein und demselben Sachverhalt erkannt und nach Möglichkeit aufgeklärt werden,
- Einzelangaben zu einem Sachverhalt mit Angaben analoger Fälle in Beziehung gesetzt und so Irrtümer erkannt werden.

Bei Beachtung dieser Kriterien genügt das kritisch bewertende Handbuch der Definition als *geordnete, berichtigte, aktualisierte* und *ballastarme* Sammlung alles bekannten Wissens. Im Gegensatz zum Referate-Organ kommt dem kritisch sichtenden Handbuch nicht nur die Rolle eines Informationsvermittlers zu; vielmehr bietet es darüber hinaus Möglichkeiten zur Fehlererkennung und -berichtigung und ist dadurch imstande, unerwünschten Ballast auszuschneiden.

Auf die Unumgänglichkeit einer derartigen kritischen Bearbeitung war auch *F. K. Beilstein* während der Vorarbeiten zur 1. Auflage seines Handbuches gestoßen. Hierzu wieder zwei Zitate aus seinen Briefen an *Erlenmeyer*^[8]: „...Es ist wirklich schauerlich zu sehen, was bis jetzt zusammengearbeitet worden ist, – wieviel Fragezeichen und Unentschiedenes, Widersprechendes habe ich schon lesen müssen...“. An anderer Stelle beklagt er, „...daß ein eitles Renommieren in die Chemie eingerissen ist, die kleinste Kleinigkeit zu einer großen Entdeckung aufgebauscht wird, ein wässriges Publizieren üblich geworden ist...“.

4. Kritische Sichtung und Bewertung am Beispiel von Beilsteins Handbuch der Organischen Chemie

Die soeben angeführten allgemeinen Kriterien der Literaturgattung „wissenschaftliches Handbuch“ werden selbstverständlich auch von den großen Handbüchern im Bereich der Chemie (*Beilstein*, *Gmelin*, *Landolt-Börnstein*) erfüllt. Das Beilsteinsche Handbuch deckt hiervon den Bereich der Organischen Chemie ab, d. h. es umfaßt die Beschreibung aller in der wissenschaftlichen Literatur behandelten Kohlenstoff-Verbindungen (mit Ausnahme von CO , CO_2 und anorganischen Carbonaten).

Im folgenden soll nun exemplarisch gezeigt werden, wie es möglich ist, durch richtige Konzeption und organisatorische Maßnahmen eine kritische Sichtung und Bewertung ohne Informationsverlust zu bewerkstelligen.

4.1. Voraussetzungen einer verlustfreien kritischen Sichtung

Bevor auf die Einzelkriterien für die kritische Sichtung eingegangen wird, seien einige allgemeine Voraussetzungen am Beispiel der Erstellung von Beilsteins Handbuch der Organischen Chemie skizziert.

4.1.1. Arbeitsverfahren

Die wichtigste Voraussetzung ist ein Arbeitsverfahren, das es in seinem ersten Schritt ermöglicht, die Originalliteratur verlustfrei auszuwerten und dann nach Überprüfung in einer zweckentsprechenden systematischen Ordnung zu speichern. Dazu gibt es aus langjähriger Erfahrung entwickelte, schriftlich festgelegte Bewertungsrichtlinien, deren optimale Anwendung durch unabhängige Prüfung aller wissenschaftlichen Entscheidungen auf mindestens zwei weiteren Ebenen gewährleistet wird. Ergänzt wurde dieses Verfahren durch eine Reihe von Fehlersuchschritten unter Verwendung modernster EDV-Technologie (z. B. Überprüfung der Summenformeln, Überprüfung und Vereinheitlichung der Nomenklatur etc.).

4.1.2. Die systematische Ordnung (Beilstein-System)

Bei der ungeheuren Fülle des zu bearbeitenden Materials ist es notwendig, daß dieses in einer streng logisch geordneten Form zugänglich gemacht wird – nicht nur dem Benutzer, sondern auch dem Bearbeiter. Die Ordnung muß so strukturiert sein, daß chemisch verwandte Verbindungen in enge Nachbarschaft gebracht werden und alle Angaben zu einer Verbindung jederzeit abfragbar sind. Dadurch wird erreicht, daß bei der Abfassung der Handbuchartikel beliebige gezielte Quervergleiche möglich sind, die dem Bearbeiter das Aufdecken und Klären von Widersprüchen erleichtern.

Diese an das Ordnungssystem zu stellenden Forderungen werden weder durch alphabetische Anordnung der Verbindungen nach ihren Namen noch nach ihren Summenformeln oder anderen abgeleiteten oder künstlichen Kriterien erfüllt. Für alle bisher bekannten organischen Verbindungen ist das Beilstein-System immer noch das einzige Ordnungsprinzip, das allen diesen Forderungen nachkommt. Es wurde in groben Umrissen schon von *F. K. Beilstein* für die 1881 erschienene 1. Auflage seines Handbuches entwickelt und dann im Jahre 1908 von *B. Prager* und *P. Jacobson* in seine endgültige Form gebracht, die sich bis heute bewährt hat.

Das Beilstein-System baut auf der Konstitutionsformel der Verbindung als einzigem Ordnungselement auf und berücksichtigt allein die vorgegebenen Struktureigenschaften („Morphologie“) der Verbindung; diese Tatsache weist es als ein *natürliches* Ordnungssystem aus.

Die Hauptordnungskriterien dieses Systems sind:

- A. Hauptabteilung (Acyclen, Isocyclen, Heterocyclen; letztere weiter unterteilt nach Art und Anzahl der Ring-Heteroatome),
- B. Funktionsklasse ($-\text{OH}$, $=\text{O}$, $-\text{COOH}$, $-\text{NH}_2$, ...),
- C. Sättigungsgrad ($\text{C}_n\text{H}_{2n-x}$),
- D. C-Zahl (Anzahl der Kohlenstoffatome insgesamt),
- E. Gerüstaufbau (unverzweigt, verzweigt; monocyclisch, bicyclisch, ...).

Über Einzelheiten des Beilstein-Systems informieren weiterführende Publikationen^[11].

4.1.3. Fachliche Kompetenz der Bearbeiter

Jede Entscheidung über Aufnahme oder Nichtaufnahme eines Sachverhaltes erfordert die fachliche Kompetenz des

Bearbeiters auf dem entsprechenden Gebiet. An der Erstellung von Beilsteins Handbuch sind deshalb gegenwärtig mehr als 100 Wissenschaftler (Chemiker) beteiligt, die durch laufende Fortbildung ihr Wissen auf dem aktuellen Stand halten. Experten betreuen an die Organische Chemie grenzende Fachgebiete (z. B. Biochemie, Metallorganische Chemie, Physik) oder Spezialgebiete (z. B. Nomenklatur).

Tabelle 2 verdeutlicht, auf welchen Bearbeitungsstufen die fachliche Kompetenz eine wesentliche Rolle spielt, d. h. ein qualifizierter Wissenschaftler tätig werden muß.

Tabelle 2. Bearbeitungsstufen und Bearbeiter des Beilstein-Handbuchs.

Bearbeitungsstufe	Bearbeiter
Kritisch auswählendes Erschließen der Originalliteratur und Überprüfung der Literaturbelege	Fachwissenschaftler (Chemiker)
Ordnen der Belege nach dem Beilstein-System	Chemotechniker und/oder EDV
Erstellung der Handbuchartikel	Fachwissenschaftler (Chemiker)
Überprüfung der Artikel (in zwei Stufen)	Fachwissenschaftler (Chemiker)
Nomenklatur und Erstellung der Register	Fachwissenschaftler (Chemiker) und EDV

4.1.4. Wissenschaftliche Hilfen

Geordnetes Material ist die Grundlage für die Tätigkeit des Handbuch-Bearbeiters; außerdem steht ihm eine Reihe von Hilfen zur Verfügung. Dazu gehört zunächst die umfangreiche Bibliothek mit allen Zeitschriften und Patenten sowie vielen Monographien und Spezialveröffentlichungen aus dem Gesamtbereich der Organischen Chemie. Fremdsprachliche Texte werden von sprachlich kompetenten Chemikern erschlossen.

4.2. Allgemeine Kriterien einer verlustfreien kritischen Sichtung

Auch heute noch ist das Grundkonzept der 1. Auflage von Beilsteins Handbuch die Basis für die Arbeit in der Beilstein-Redaktion.

F. K. Beilstein formulierte es im Vorwort seines Werkes^[12] so: „Im vorliegenden Werk habe ich den Versuch gemacht, sämtliche analysierte organische Verbindungen möglichst übersichtlich zusammen zu stellen ... flüchtige, oberflächliche Angaben, nicht genauer untersuchtes Verhalten und Reaktionen und dergleichen daher weg zu lassen ... alles, was zu einer genauen Kenntnis der Substanzen beiträgt, wie Schmelzpunkt, Siedepunkt, spezifisches Gewicht, Löslichkeit und so weiter, sowie die genauer untersuchten Umwandlungen und Reaktionen der Körper vollständig wieder zu geben ... alle Angaben den Originalabhandlungen der Verfasser zu entnehmen ...“

Diese Kriterien mußten allerdings im Hinblick auf die enorm gestiegene Zahl von Dokumenten und auf den Fortschritt des chemischen Wissens in den letzten 100 Jahren verfeinert, weiterentwickelt und den jeweils neuesten Erkenntnissen angepaßt werden. Immer stand dabei das Bedürfnis nach neuen, gesicherten Informationen im Vordergrund, und als oberster Grundsatz galt und gilt, alle für den Chemiker interessanten Informationen über jede organische Verbindung zu dokumentieren. Um dieses Ziel mit

dem Bestreben um maximale Datenreduktion (Eliminieren redundanter Informationen) zu vereinbaren, bedarf es der Beachtung der im folgenden genannten Kriterien einer verlustfreien kritischen Sichtung.

4.2.1. Sachliche Richtigkeit der Information

Der erste Schritt einer kritischen Sichtung ist die Prüfung, ob die gegebene Information mit dem heutigen allgemeinen chemischen Wissen verträglich ist, ob sie mit dem gesamten bisherigen Wissen über diese Verbindung in Einklang ist und ob Widersprüche zu Angaben über homologe oder analoge Verbindungen sichtbar werden. Treten bei dieser Prüfung Diskrepanzen oder Unklarheiten auf, so zieht dies tiefergehende Recherchen nach sich, als deren Resultat gegebenenfalls Berichtigungen oder Vorbehalte im Artikel der betreffenden Verbindung vermerkt werden.

4.2.2. Tiefe der Information

Es gehört zur betrüblichen Alltagserfahrung des informationssuchenden Chemikers, daß er bei der Recherche in Referateorganen auf Primärveröffentlichungen hingewiesen wird, deren Informationswert nicht den Aufwand für die Suche gelohnt hat. Bei der Erstellung des Handbuches wird deshalb geprüft, ob die Information eine gewisse „Mindesttiefe“ (Mindest-„Gehalt“) aufweist.

Liegen zu einem Sachverhalt Informationen aus *mehreren* Veröffentlichungen vor, so wird im Interesse einer optimalen Datenkomprimierung geprüft, ob nicht auf einige dieser Angaben ohne Informationsverlust verzichtet werden kann. Anhaltspunkte für die Auswahl in diesen Fällen sind in den folgenden Abschnitten notiert.

4.2.3. Vollständigkeit und Ausführlichkeit der Information

Eine Veröffentlichung informiert dann maximal, wenn alle relevanten Einzelheiten genau beschrieben und alle wichtigen Parameter angegeben sind. Dies ist eine erkennbare Voraussetzung für die zu fordernde Reproduzierbarkeit der angegebenen Befunde.

4.2.4. Sinn und Ziel der Veröffentlichung

Ein weiteres bedeutsames Kriterium für die kritische Auswahl ist auch die Untersuchung der Frage nach Sinn und Ziel der Veröffentlichung. Es ist eine große Hilfe, bei der Sichtung zu erkennen, ob die fragliche Information im Zentrum des Interesses des Autors und damit der Veröffentlichung steht und wesentliches Ziel der Arbeit ist oder ob sie nur in Form einer beiläufigen Bemerkung auftaucht. Sicherlich wird der „Informationsverbraucher“ ein Ergebnis aus einer Arbeit, die sich mit dem theoretischen Hintergrund, dem Umfeld und dem weiteren Zusammenhang der Information beschäftigt, einer sonst gleichwertigen Veröffentlichung, die kommentarlos z. B. das Meßergebnis präsentiert, vorziehen.

4.2.5. Zugänglichkeit der Information

Obwohl das Handbuch vor allem „Datendokumentation“ und nur bei komplexen Sachverhalten „Literatur-

nachweis“ betreibt, spielen für den Bearbeiter wie für den Benutzer Überlegungen zu Beschaffbarkeit, Lesbarkeit (Sprache) und Alter der Originalveröffentlichung eine beachtliche Rolle. Bei Veröffentlichungen zum gleichen Thema wird man bei gleicher Informationstiefe und -ausführlichkeit gewöhnlich die Veröffentlichung in der leichter zugänglichen Zeitschrift, in der allgemeiner verständlichen Sprache und mit dem „neueren“ Erscheinungsdatum vorziehen.

4.2.6. Herkunft der Information

Ein nur mit großer Vorsicht zu handhabendes Kriterium sind die Fragen nach Kompetenz des Autors und Güte der Zeitschrift. Immerhin kann – im Zusammenspiel mit den vorgenannten Kriterien – die Kenntnis, daß der Autor auf dem Gebiet, aus dem die Information stammt, schon ein anerkannter Fachmann ist, die Arbeitsgruppe schon größere Erfahrungen auf diesem Gebiet besitzt und die Veröffentlichung in einer Zeitschrift mit besonders strengen Aufnahmebedingungen erschienen ist, manchmal Entscheidungshilfe leisten.

4.3. Sachverhaltsbezogene Kriterien einer verlustfreien kritischen Sichtung

Handelte es sich bei den bisher genannten Kriterien um für alle Handbuch-Informationen gültige Überlegungen, so sollen jetzt die für einzelne Sachverhalte relevanten Kriterien am Beispiel der wichtigsten in Beilsteins Handbuch behandelten Sachverhaltsgruppen („Aufnahme von Verbindungen“, „Herstellung“, „Physikalische Eigenschaften“, „Analytik“ und „Chemisches Verhalten“) für die Beschreibung organischer Verbindungen erläutert werden.

4.3.1. Kriterien für die Aufnahme von Verbindungen

Grundsätzlich erscheint es nur sinnvoll, *isolierte* oder *sicher nachgewiesene* Verbindungen *eindeutiger* Zusammensetzung in einer kritisch gesichteten chemischen Datensammlung zu beschreiben.

Identität der Verbindung

Wichtigste Voraussetzung für die Beschreibung – und damit für die Benennung, Dokumentation und Wiederauffindbarkeit – einer Verbindung ist die Kenntnis ihrer Identität, also ihrer chemischen Struktur, die durch ihre Konstitution und Konfiguration sowie auch durch ihre Konformation festgelegt wird.

Verbindungen unbekannter Konstitution lassen sich auch bei gesicherter Zusammensetzung (nach Ausweis der Elementaranalyse) nicht eindeutig genug beschreiben, um sie in der Datensammlung sinnvoll einordnen und mit vertretbarem Aufwand wieder auffinden zu können (z. B. „Verbindung $C_8H_{14}O_2$ mit $F_p = 184-186^\circ C$ “).

Nur bei geringen Unsicherheiten einer ansonsten gesicherten Konstitution (z. B. Position einer Methyl-Gruppe in der Seitenkette oder Lage einer $C=C$ -Doppelbindung) erscheint die Wiederauffindbarkeit einigermaßen gewährleistet und damit diese Voraussetzung für die Aufnahme

der Verbindung erfüllt. (Im Gegensatz dazu muß die Konfiguration einer Spezies nicht unbedingt gesichert sein; auch Präparate mit unbekannter oder uneinheitlicher Konfiguration sollten bei bekannter Konstitution wiederauffindbar dokumentiert werden können.)

Die Konstitution oder Konfiguration einer Verbindung gilt dann als gesichert, wenn sie durch die beschriebene, nach der allgemeinen Erfahrung eindeutige Bildungsweise der Substanz, durch Elementaranalyse und durch physikalische Messungen (z. B. Spektren) oder chemische Methoden (z. B. gezielter Abbau) bestätigt wird.

Bestehen Zweifel an der Richtigkeit der Zuordnung von Konstitution oder Konfiguration einer Verbindung, so erfordert die kritische Bearbeitung eine Literatur-Recherche nach weiteren Angaben zu möglichen Strukturen dieser Verbindung. Führt diese Recherche nicht zur Klärung, ist die Suche nach verwandten Verbindungen gesicherter Struktur unerlässlich, um möglicherweise anhand eines Analogieschlusses Auskunft über die fragliche Konstitution oder Konfiguration zu erhalten.

Charakterisierende Angaben

Die Mitteilung der bloßen Existenz einer Verbindung reicht jedoch nicht für ihre Aufnahme ins Handbuch aus, da diese Information für sich allein nur wenig nützlich ist.

Zusätzlich zur gesicherten Identität sollte noch mindestens ein Datum, z. B. eine Angabe über die Synthesemethode, eine charakterisierende Größe (physikalische Eigenschaft oder chemische Reaktivität) oder eine entsprechende Angabe für ein Salz oder ein Derivat dieser Verbindung vorliegen.

An die Qualität der charakterisierenden Angaben müssen sinnvolle Anforderungen gestellt werden; wichtig ist vor allem, daß die Meßgröße des Datums nicht durch eine objektimmanente Unsicherheit beeinflusst wird. So sind z. B. Angaben über das optische Drehvermögen konfiguratив nicht einheitlicher Verbindungen (Präparate) zur Charakterisierung ebenso ungeeignet wie der Schmelzpunkt eines Diastereomeren-Gemischs. Als grob abgesteckter Orientierungsrahmen für die Aufnahme von Verbindungen mag angesehen werden:

- Verbindungen gesicherter Konstitution und einheitlicher Konfiguration, von denen mindestens ein Datum bekannt ist, sind grundsätzlich aufnahmewürdig.
- Bestehen Zweifel nur in bezug auf einen relativ unwesentlichen Teil der im übrigen gesicherten Konstitution einer Verbindung, so sollten die konfigurative Einheitlichkeit und Zuordnung des „Hauptteils“ gewährleistet sein und genügend charakterisierende Daten vorliegen, um durch eventuell erst nach weiteren publizierten Untersuchungen in Zukunft mögliche Vergleiche mit geeigneten Präparaten die Identität nachträglich sichern zu können.
- Ist die Konstitution eines konfiguratив uneinheitlichen oder fragwürdigen Präparats gesichert, so sollten Daten vorliegen, deren Größe nicht von der Konfiguration abhängt.

4.3.2. Kriterien für die Beurteilung der Angaben zur Herstellung

Allgemeines

Die Angaben der Primärliteratur über die Herstellung von Verbindungen bieten oft besonders wirkungsvolle Ansatzpunkte für eine kritische Sichtung unter Verzicht auf obsoletere Ballast-Informationen.

So wird auf die Wiedergabe von Bildungsweisen ohne erkennbaren präparativen Wert immer dann verzichtet, wenn bereits andere brauchbare Verfahren zur Herstellung der Verbindung bekannt sind; vor allem bei häufig beschriebenen Verbindungen ist hier ein strenger Maßstab anzulegen.

Angaben zu altbekannten Herstellungsverfahren werden nur dann aufgenommen, wenn eine Verbesserung oder zumindest eine gleichwertige Modifikation des früheren Verfahrens erreicht wird. Chemische Reaktionen, bei denen die Bedingungen offensichtlich auf die Gewinnung eines anderen Produkts gerichtet waren, werden nur dann berücksichtigt, wenn keine präparativ brauchbaren Alternativen beschrieben sind. Bei der Beurteilung eines Herstel-

lungsverfahrens ist daher stets die Frage zu stellen, ob das Ziel der Reaktion die Synthese einer Verbindung oder nur der Beweis der Identität des Edukts durch Abbau oder Derivatisierung ist.

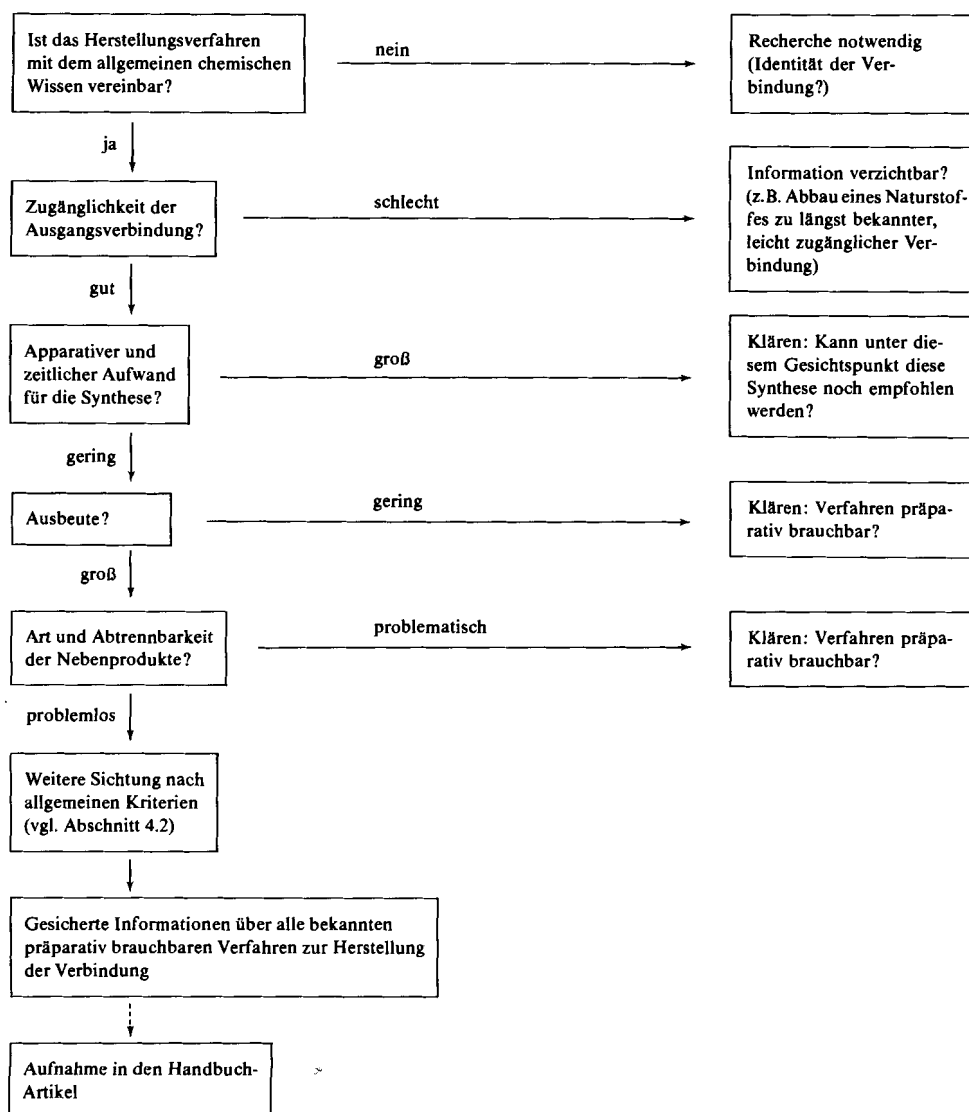
Vorgehen bei der kritischen Sichtung von Herstellungsverfahren

Liegen zu einer Verbindung mehrere Angaben über verschiedene Verfahren ihrer Herstellung vor, so empfiehlt es sich bei der kritischen Sichtung dieser Angaben, jede einzelne Information nach dem in Tabelle 3 gezeigten Schema zu prüfen.

Die erste Frage untersucht, ob die bei der Synthese ablaufende oder so gedeutete Reaktion überhaupt mit dem allgemeinen chemischen Wissen in Einklang gebracht werden kann und berührt damit das schon in Abschnitt 4.3.1 diskutierte Problem der Identität der hergestellten Verbindung. Im Zweifelsfalle darf auf Recherchen zur Klärung nicht verzichtet werden.

Liegen nach positiver Beantwortung der ersten Frage noch mehrere Angaben zur Herstellung der Verbindung vor, so ist nun zu prüfen, wie (relativ) gut die Vorstufen zu-

Tabelle 3. Schema für die kritische Sichtung und Bewertung von Informationen über die Herstellung einer Verbindung.



gänglich sind, welchen experimentellen Aufwand (apparativ und zeitlich) die Synthese erfordert, wie hoch die Ausbeute ist, welche Nebenprodukte entstehen und wie sich diese abtrennen lassen.

Richtig angewendet können anhand dieses Schemas vor allem bei einer Vielzahl von Informationen zur Herstellung derselben Verbindung die besten und wichtigsten Verfahren herausgefunden werden.

Eine abschließende Sichtung nach den in Abschnitt 4.2 genannten allgemeinen Kriterien gestattet eine weitere Auswahl unter eventuell vorhandenen Mehrfachinformationen gleichen Inhalts.

4.3.3. Kriterien für die Beurteilung der Angaben zu den physikalischen Eigenschaften

Reinheit der Substanz

Oberstes Kriterium ist die Reinheit der untersuchten Substanz (Einheitlichkeit der Konstitution und Konfiguration). Einen ersten Hinweis hierauf gibt die Elementaranalyse. Danach ist zu prüfen, ob Reinigung durch Umkristallisation, Destillation, Chromatographie etc. angestrebt wurde, oder ob die Verbindung nur als Zwischenprodukt oder Rohprodukt vorgelegen hat.

Art der Meßmethode und Vollständigkeit der Beschreibung experimenteller Bedingungen

Hierbei ist zunächst die Meßmethode für die Ermittlung der zur Diskussion stehenden physikalischen Größe zu prüfen. Handelt es sich um eine „klassische“, schon lange bekannte Größe (z. B. Schmelzpunkt, Siedepunkt, Brechungsindex etc.), so spielt die Meßmethode eine geringere Rolle als bei der Ermittlung einer Größe mit modernen Methoden (z. B. NMR-, NQR-, ESR-Spektroskopie etc.), bei denen der jeweilige Entwicklungsstand der verwendeten Meßgeräte für die Beurteilung der Qualität der Messung ausschlaggebend ist.

Einen weiteren Anhaltspunkt bietet auch die Beschreibung des Experiments, die je nach ihrer Ausführlichkeit ein mehr oder weniger genaues Nachvollziehen ermöglicht.

Vollständigkeit und Genauigkeit der Angaben

Die Angabe eines physikalischen Datums ist nur dann von Nutzen, wenn alle notwendigen Parameter genannt sind. Fehlergrenze sowie exakte Angabe der Dimension erleichtern Qualitätsvergleiche numerischer Werte.

Sachverhaltsspezifische Kriterien

Neben den schon erwähnten, für die Beurteilung aller physikalischen Sachverhalte gültigen Richtlinien gibt es eine Reihe von sachverhaltsspezifischen Kriterien, die hier nicht alle aufgeführt werden können. Es soll aber an drei repräsentativen Beispielen gezeigt werden, worauf es bei solchen detaillierten Überlegungen ankommt.

a) IR-Spektrum: Berücksichtigt werden die Art der Präparation der Probe (Film, KBr, Nujol oder $\text{CCl}_4 + \text{CS}_2$ etc.), die Auflösung des verwendeten IR-Spektrometers, der Meßbereich und die Art der Darstellung des Spektrums in der Veröffentlichung (nur Bandentabelle oder ganzes Spektrum? Größe und Genauigkeit der Wiedergabe des Spektrums?).

b) Dipolmoment: Prüfstein ist hier zunächst die Meßmethode (Mikrowellenspektrum oder Messung in Lösung). Weiter ist zu fragen: Welches Lösungsmittel wurde benutzt (unpolar oder polar) und welche Auswertungsmethode (Debye, Onsager, Kirkwood etc.)? Wurde bei freier Drehbarkeit im Molekül die sich daraus ergebende Temperaturabhängigkeit des Dipolmoments beachtet?

c) Dissoziationskonstante^[13]: Zunächst ist wiederum die Art der Meßmethode zu prüfen (Ermittlung der Meßwerte durch potentiometrische, konduktometrische, spektrophotometrische oder kinetische Verfahren), da den in Frage kommenden Methoden sehr unterschiedliche Fehler anhaften. Weiter ist wichtig, ob die Ionenstärke und bei Präzisionsmessungen die Grenzflächen- und Überführungspotentiale angegeben sind. Bei Messungen in nichtwäßrigen Lösungen ist außerdem eine genaue Definition des pH-Wertes erforderlich.

Insgesamt verdeutlichen diese drei Beispiele, daß der kompetente Fachwissenschaftler für die Anwendung von bewertenden Kriterien auf die einzelnen Sachverhalte unersetzbar ist.

4.3.4. Kriterien für die Beurteilung der Angaben zur Analytik

Durch die zunehmende Anwendung physikalischer Methoden in der Analytik gelten hier die gleichen Kriterien, die zuvor im Abschnitt 4.3.3 in bezug auf die physikalischen Eigenschaften angeführt wurden. Hinzu kommt, daß nur substanzspezifische Eigenschaften berücksichtigt werden; analytische Eigenschaften, die für eine Verbindungsklasse typisch sind (z. B. Farbreaktionen von Phenolen), bleiben hingegen unerwähnt. Besonderer Wert wird auf die Eindeutigkeit und Reproduzierbarkeit des analytischen Nachweises gelegt.

4.3.5. Kriterien für die Beurteilung der Angaben zum chemischen Verhalten

Am Anfang steht hier die Überlegung, ob der angegebene Reaktionsverlauf mit dem allgemeinen chemischen Wissen verträglich ist und ob Konstitution und Konfiguration der Reaktionsprodukte sicher nachgewiesen sind oder ob nur Vermutungen darüber vorliegen.

Bei *qualitativen Untersuchungen* ist besonders darauf zu achten, ob die Aufklärung des Verlaufs dieser Reaktion Ziel und wesentlicher Bestandteil der Publikation sind. Bei Untersuchungen, deren Zweck die Herstellung einer Verbindung oder die Aufklärung einer Struktur (z. B. durch Abbaueversuche an Naturstoffen) ist, wird die Neuartigkeit der beschriebenen Reaktionen als Kriterium herangezogen. Verzichtet werden kann auf alle bekannten Reaktionen, wenn diese schon bei vielen anderen analogen Verbindungen untersucht und somit Allgemeinwissen geworden sind.

Bei *quantitativen Untersuchungen* (Kinetik und Gleichgewicht), bei denen es sich um substanzspezifische Eigenschaften handelt, ist dagegen die entsprechende Angabe bei jeder beschriebenen Verbindung angebracht, wobei aber auch hier wieder geprüft werden muß, wie genau die Beschreibung ist und welche relevanten Parameter angegeben sind. Bei kinetischen Untersuchungen ist auch beson-

ders auf die Qualität der Messung und der Auswertung zu achten.

Auch die Frage nach der konfigurativen Einheitlichkeit tritt hier wieder in den Vordergrund, da sie für den Verlauf einer Reaktion fast immer von entscheidender Bedeutung ist.

5. Die Bedeutung der kritischen Sichtung und Bewertung in der Dokumentation heute und morgen

Nachdem bisher die wesentlichsten Kriterien für die kritische Auswahl und Beurteilung von Befunden am Beispiel des Handbuchs der Organischen Chemie genannt und erläutert wurden, soll nun die Größenordnung der daraus resultierenden Informationskomprimierung verdeutlicht, ein Eindruck von den Möglichkeiten zur Erkennung und Berichtigung von Fehlinformationen vermittelt sowie die Bedeutung dieser Effekte für den Informationssuchenden dargelegt werden.

5.1. Beispiele für das Ausmaß der möglichen verlustfreien Datenreduktion

Am Beispiel der Bearbeitung dreier Verbindungen sei die Funktionsfähigkeit des zuvor diskutierten Systems der kritischen Sichtung und Bewertung aufgezeigt und eine Vorstellung von der möglichen Datenreduktion bei konsequenter sinnvoller Anwendung der genannten Kriterien gegeben. Die Ergebnisse dieses Tests, die auf einem Vergleich der für die gewählten Verbindungen in einem die Primärliteratur vollständig berücksichtigenden Referate-Organ (Chemical Abstracts) und im Beilstein-Handbuch zitierten Veröffentlichungen beruhen, sind in Tabelle 4 zusammengefaßt. (Die detaillierten Unterlagen und Einzel-

schränkt^[*]. Die Informationen wurden mit bereits in früheren Serien des Beilstein-Handbuchs beschriebenen Angaben zur jeweiligen Verbindung verglichen und auf ihre Dokumentationswürdigkeit geprüft. Wie Tabelle 4 zeigt, war bei den gewählten Beispielen eine Reduktion der Anzahl der Zitate auf etwa die Hälfte möglich. Hierzu ist anzumerken, daß diese Komprimierung um ca. 50% nach den Erfahrungen der Beilstein-Redaktion nur für mäßig stark bearbeitete Verbindungen gilt, d. h. für Verbindungen, über die jährlich in etwa 1 bis 5 Publikationen berichtet wird. Bei sehr stark bearbeiteten Verbindungen wird jedoch ein wesentlich höherer Reduktionsgrad erreicht; in Extremfällen werden manchmal weniger als 10% der zu einer bestimmten Sachverhaltsgruppe gehörenden Originalzitate in das Handbuch aufgenommen. Völlig anders ist die Situation selbstverständlich bei Verbindungen, die nur in einem einzigen Originaldokument beschrieben werden; da in solchem Fall kein kritischer Vergleich mehrerer Angaben in Relation zueinander möglich ist, beschränkt sich die Frage einer Datenreduktion auf die Prüfung, ob die Kriterien für die Aufnahme der Verbindung überhaupt erfüllt sind.

5.2. Beispiele für die Erkennung und Berichtigung fehlerhafter Primärinformationen

Die Eliminierung redundanter Informationen ist, wie aus Abschnitt 4 hervorgeht, nur *ein* Teilaspekt der kritischen Bearbeitung von Primärinformationen. Ein weiterer wesentlicher Gesichtspunkt, auf dessen eminente Bedeutung für den Informationssuchenden wohl nicht näher eingegangen werden muß, ist die Erkennung und Berichtigung fehlerhafter Angaben in der Originalliteratur. Eine Analyse von Band 19 des Beilstein-Handbuchs^[**] ergab, daß bei mehr als 2500 Verbindungen berichtende Anga-

Tabelle 4. Ausmaß der Informationskomprimierung im Beilstein-Handbuch durch kritische Sichtung.

Name der Verbindung, Beilstein-Zitat	Anzahl der Zitate im Beil- stein „a“	in Chemical Abstracts „b“	Bei der Beilstein-Bearbeitung eliminiert, da Sachverhalt bereits bekannt und in frühe- rer Beilstein- Serie beschrieben	Doppelveröffent- lichung (Vorver- öffentlichung)	nach weiteren Kriterien nicht dokumentations- würdig	Reduzierung der Anzahl der Zitate im Beilstein [i]	Nur im Beilstein unter dieser Ver- bindung ge- brachte Zitate „c“
9-Bromanthracen E IV 5 2295 [a]	14 [b]	24 [b]	1 [c]	3	7 [h]	2:1	1
3-Aminocrotonsäure- ethylester E IV 4 2841/2	5 [b] (+2) [c]	10 [b]	4 [f]	1	2 [h]	3:1	2
3,6-Dimethoxypyridazin E III/IV 23 3089/90	12 [d]	15 [d]	0 [g]	3	1 [h]	4:3	1

[a] E IV 5 2295: Beilstein, 4. Ergänzungswerk, Band 5, S. 2295. [b] Literaturzeitraum: 1950–1959. [c] Je eine Angabe über die Konstitution (Tautomerie) und eine Berichtigung einer früheren Information über das chemische Verhalten der Verbindung aus dem Literaturzeitraum nach 1959. [d] Literaturzeitraum: 1930–1959. [e] Literaturangaben aus dem Zeitraum vor 1950 finden sich in folgenden Beilstein-Serien: Hauptwerk, 5 665; 1. Ergänzungswerk, 5 326; 2. Ergänzungswerk, 5 576; 3. Ergänzungswerk, 5 2134. [f] Literaturangaben aus dem Zeitraum vor 1950 finden sich in folgenden Beilstein-Serien: Hauptwerk, 3 654; 1. Ergänzungswerk, 3 228; 2. Ergänzungswerk, 3 423, 3. Ergänzungswerk, 3 1199. [g] Aus dem Zeitraum vor 1930 liegen keine Literaturangaben vor. [h] Überwiegend Angaben, die in anderen Veröffentlichungen zu dieser Verbindung ausführlicher beschrieben sind. [i] b: (a–c).

heiten zu diesem Test können Interessenten von der Beilstein-Redaktion zugänglich gemacht werden.)

Dieser Test wurde bei den Beispielen 1 und 2 auf Veröffentlichungen aus den Jahren 1950–1959, bei Beispiel 3 auf Veröffentlichungen aus den Jahren 1930–1959 be-

[*] Zur Abklärung wesentlicher Befunde (z. B. zur Konstitution und Konfiguration) werden bei der Bearbeitung des Beilstein-Handbuchs jedoch auch die aktuellen Publikationen, bis hin zum Erscheinungsdatum eines jeden Teilbandes, mit herangezogen (vgl. Tabelle 4, Fußnote [c]).

[**] Beilsteins Handbuch der Organischen Chemie, 3. + 4. Ergänzungswerk; Band 19 beschreibt ca. 26000 Verbindungen auf über 5000 Textseiten. Für die Ausführung der Analyse danken wir Dr. Th. Schmitt, Beilstein-Institut.

ben zur Konstitution aus späteren Veröffentlichungen berücksichtigt werden mußten oder erstmalig eindeutige Konstitutionszuordnungen durch Analogieschlüsse sowie aufgrund genetischer Beziehungen zum Edukt oder Folgeprodukt durch die Beilstein-Redaktion getroffen wurden. Durch kritische Bearbeitung gelang es demnach, die Konstitution nahezu jeder zehnten Verbindung richtigzustellen oder zu sichern. Entsprechendes gilt auch für alle übrigen Sachverhaltsangaben über die beschriebenen Verbindungen, insbesondere für alle Zahlenwerte.

Friedrich Konrad Beilsteins „geläufige Zunge“, die ihm nach eigenem Bekunden „Gott ins Maul gesetzt“ hatte, formulierte 1880 – in Vorahnung des Erfolgs seines Handbuchs – den Nutzen der kritischen Bearbeitung für den Leser seines Handbuchs so: „... Was werden sich erst Leute wie *Richter*, *Wislicenus*, *Kolbe* und andere Fabrikanten kleiner Büchlein freuen, denen alles mundgerecht gemacht ist und die nun *scheffelweise* aus meinen wohlgefüllten Säcken die Weisheit herausschöpfen können, um sie *teelöffelweise* wieder von sich zu geben ...“^[8].

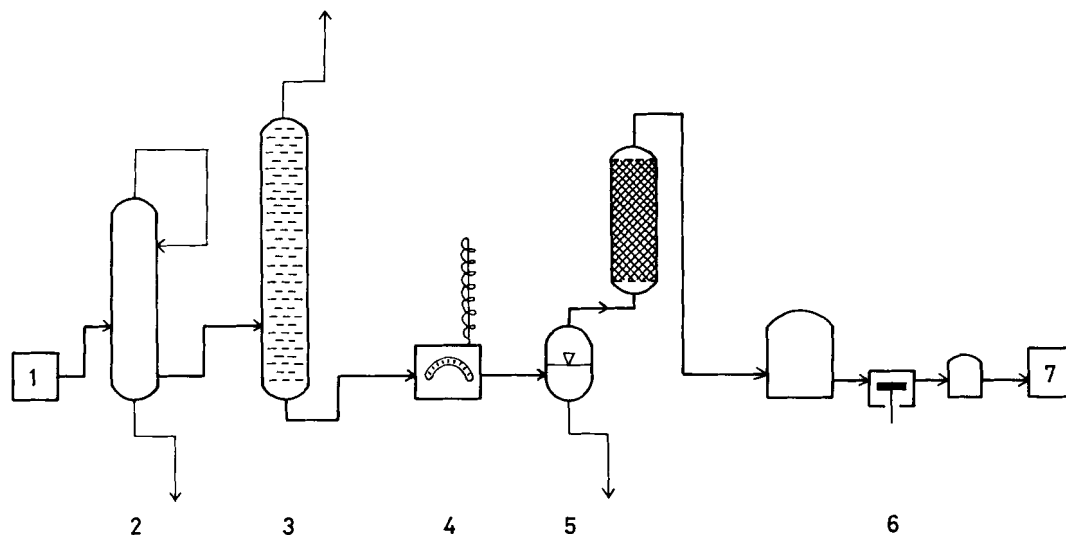


Abb. 2. Das Verfahren der kritischen Sichtung. Die Verarbeitung der wissenschaftlichen Primärliteratur hat wegen ihres enormen Umfangs heute beinahe „großtechnische“ Dimensionen erreicht. Die einzelnen Stufen der kritisch wertenden Bearbeitung lassen sich daher in der Symbolik eines verfahrenstechnischen Prozeßablaufs darstellen: 1 Primärliteratur; 2 Extraktion der Primärliteratur; 3 Abdestillieren „flüchtiger“ Informationen; 4 Analyse und Bewertung, Erkennen fehlerhafter Angaben; 5 Abscheiden von Doppelinformationen, Adsorption fehlerhafter Angaben; 6 Verdichten der Informationen; 7 wissenschaftlich bewertete Information.

5.3. Bedeutung für den Benutzer

Anhand der in Tabelle 4 zusammengestellten Testbeispiele kann die Funktionsfähigkeit des Verfahrens der „kritischen Sichtung ohne Informationsverlust“ demonstriert werden. Die soeben erwähnte Analyse des Inhalts von Band 19 des Beilstein-Handbuchs zeigt, in welchem breitem Umfang durch kritische Bearbeitung Fehler erkannt werden können. Dieses Verfahren der kritischen Bearbeitung und Sichtung ist die Grundlage der täglichen Arbeit der wissenschaftlichen Mitarbeiter der Beilstein-Redaktion.

Welche Vorteile, welchen Nutzen kann der Informationssuchende aus einer derart aufbereiteten Daten- und Faktensammlung ziehen?

- Erhöhte Sicherheit für die Richtigkeit der geprüften Daten,
- Verminderung der Gefahr von Fehlschlüssen und nicht optimaler Versuchsplanung aufgrund unexakter Literaturangaben,
- Möglichkeit ballastarmer Recherchen durch Konzentrieren auf verlässliche Daten,
- Aufwendige intellektuelle „Nach-Selektion“ unnötig, daher Zeitersparnis,
- Garantie, daß keine relevante Information verlorengeht.

5.4. Zusammenfassung und Ausblick

In den vorausgehenden Abschnitten wurde eine Auswahl wichtiger Überlegungen, Kriterien und Richtlinien vorgestellt, die es dem kompetenten Wissenschaftler ermöglichen, die in den Bereich seiner Fachdisziplin (hier: der Chemie) fallenden publizierten Daten und Fakten kritisch zu sichten, auswählend zu werten und schließlich verlustlos zu dokumentieren oder an den Informationssuchenden weiterzugeben. Dieses Vorgehen hat sich nicht nur für den sachkundigen Monographie-Autor innerhalb eines begrenzten Teilbereichs bestens bewährt, sondern ebenso für die wissenschaftlichen Handbuch-Bearbeiter, denen die Aufgabe der kritischen Sichtung für eine gesamte Disziplin (hier: die Organische Chemie) obliegt.

Das 100jährige Bestehen von Beilsteins Handbuch der Organischen Chemie zeugt von Bewährung und von Kompetenz und beweist, welche Bedeutung die Benutzer der Kontinuität seines geschilderten Grundkonzepts und der erprobten Verlässlichkeit dieses Werkes beimessen. Die Aufgabe seiner Ersteller wird es sein, die im Prinzip bewährte Konzeption „des Beilstein“, nämlich die als kritisch wertendes Handbuch, grundsätzlich beizubehalten, sie aber in der praktischen Durchführung flexibel an gegenwärtige und zukünftige Entwicklungen sowohl der technischen Innovation als auch der Benutzerbedürfnisse anzupassen. Die ständig zunehmende Datenfülle wird nur

dann bewältigt werden können, wenn zukünftig strengere Maßstäbe an die Originalität und die Genauigkeit aufzunehmender Befunde angelegt werden.

An der Schaffung auch eines computerisierten „Information Retrievals“ im Beilstein wird gegenwärtig gearbeitet. Hierbei wird auch die Frage mit einbezogen, inwieweit eine für den Beilstein-Benutzer sinnvolle Querbeziehung zu anderen, bereits bestehenden computerorientierten Chemie-Informationssystemen geschaffen werden kann und soll.

Aber auch bei verstärkter Nutzung der EDV in der wissenschaftlichen Dokumentation und Information wird sich an der hier geschilderten Bedeutung einer kritischen Sichtung nichts ändern. Vielmehr wird angesichts der zunehmenden Menge an Informationen über kurz oder lang auch bei der Einspeicherung von Daten in computerabfragbare Informationssysteme eine vorherige kritische Wertung an Bedeutung gewinnen, da nur so eine Begrenzung der anderenfalls unübersehbaren Datenmengen möglich ist. Zu beachten ist dabei, daß diese kritische Wertung immer den Fachwissenschaftler mit entsprechender Ausbildung erfordert, denn nur er vermag die Voraussetzungen und Kriterien für die Aufnahme von Daten zu verwirklichen.

Da viele der genannten Bewertungskriterien, mutatis mutandis, sicherlich weit über den hier diskutierten Bereich der Chemie hinaus Bedeutung haben, stellt das Verfahren der kritischen Sichtung generell auch für andere wissenschaftliche Disziplinen eine Möglichkeit dar, die gegenwärtige (und zukünftige) Informationsflut in geordnete Bahnen zu lenken.

Eingegangen am 16. März 1981 [A 386]

- [1] R. Luckenbach, J. Sunkel, Naturwissenschaften 68, 53 (1981).
- [2] R. Luckenbach, Chem. Unserer Zeit 15, 46 (1981).
- [3] D. A. O'Sullivan, Chem. Eng. News 59 (20), 21 (1981).
- [4] K.-C. Buschbeck, W. Lippert, E. Uhlein, Naturwissenschaften 55, 379 (1968).
- [5] CAS Today, American Chemical Society, Columbus, Ohio 1980.
- [6] a) S. A. Goudsmit, Phys. Today 19, 52 (1966); b) R. Abbel, Nachr. Dok. 21, 95 (1970).
- [7] J. P. Phillips, Chymia 11, 89 (1966).
- [8] O. Krätz: Beilstein-Erlenmeyer, Briefe, Neue Münchner Beiträge zur Geschichte der Medizin und Naturwissenschaften, Naturwissenschaftshistorische Reihe Bd. 2, Werner Fritsch, München 1972.
- [9] Nachr. Chem. Tech. Lab. 28, 501 (1980).
- [10] E. Uhlein, Nachr. Dok. Beih. 14 (1966).
- [11] a) Kennen Sie Beilstein? Erläuterungen zu Beilsteins Handbuch der Organischen Chemie, Springer-Verlag, Berlin 1979; b) R. Luckenbach, R. Ecker, E. Hoffmann, J. Sunkel, noch unveröffentlicht.
- [12] F. Beilstein: Handbuch der Organischen Chemie, 1. Aufl., L. Voss-Verlag, Hamburg und Leipzig 1881.
- [13] G. Kortüm, W. Vogel, K. Andrussov: Dissoziationskonstanten organischer Säuren in wäßriger Lösung, Butterworths, London 1961, S. 191 ff.

Zerlegung und Rekonstruktion von Genen und Chromosomen (Nobel-Vortrag)^[**]

Von Paul Berg^[*]

1. Einleitung

"Although we are sure not to know everything and rather likely not to know very much, we can know anything that is known to man, and may, with luck and sweat, even find out some things that have not before been known to man."

J. Robert Oppenheimer

Obwohl das Konzept, daß Gene erbliche Merkmale weitergeben und kontrollieren, schon seit Anfang des Jahrhunderts bekannt ist, vereitelte die Unkenntnis ihrer chemischen Natur die meisten Untersuchungen über ihre Funktion. Das änderte sich in der Folge einiger dramatischer Entwicklungen in den Jahren zwischen 1940 und 1970. Zuerst stützten die Ergebnisse der Arbeiten von Beadle und Tatum^[1-3] sehr stark die ältere^[4] und weit verbreitete Annahme, daß Gene die Bildung von Proteinen (Enzymen) kontrollieren; die Hypothese „ein Gen – ein Protein“ intensivierte die Suche nach der chemischen

Grundlage eines Gens. Einen ersten Hinweis brachte die Entdeckung von Avery et al.^[5] und später von Hershey und Chase^[6], daß die genetische Information in der chemischen Struktur der Desoxyribonucleinsäure (DNA) enthalten ist. Die Aufklärung der molekularen Struktur der DNA – die dreidimensionale Anordnung der polymerisierten Nucleotiduntereinheiten – durch Watson und Crick^[7] enthüllte nicht nur den allgemeinen Aufbau von Genstrukturen, sondern offenbarte auch die Art und Weise der Genreplikation und -funktion. Plötzlich waren Gene nicht mehr nur begriffliche und statistische Größen, sie hatten vielmehr eine definierte chemische Identität erlangt. Die Genchemie (genetic chemistry) oder – wie sie häufig genannt wird – die Molekularbiologie war geboren.

Bis vor wenigen Jahren wurde ein großer Teil der Detailkenntnis der molekularen Genstruktur, -organisation und -funktion aus Untersuchungen an prokaryotischen Mikroorganismen und den sie befallenden Viren gewonnen, speziell aus *Escherichia coli* sowie den T- und λ -Bakteriophagen. Diese wurden von den Molekularbiologen wegen ihrer sehr hohen Vermehrungsrate unter kontrollierbaren Laborbedingungen bevorzugt. Die Kartierung und Manipulation ihrer relativ kleinen Genome wurde zur Routine, nachdem man begonnen hatte, einige der Mittel des

[*] Prof. Dr. P. Berg
Department of Biochemistry, Stanford University School of Medicine
Stanford, California 94305 (USA)

[**] Copyright © The Nobel Foundation 1981. – Wir danken der Nobel-Stiftung, Stockholm, für die Genehmigung zum Druck dieser Übersetzung.