

wie Ethylen bewußt nicht eingegangen wurde. Zu bemängeln ist allerdings der völlige Verzicht auf Literaturhinweise.

Christiane Schneider
Institut für Organische Chemie
der Universität Heidelberg

Electronic Conference on Trends in Organic Chemistry, ECTOC 1. Herausgegeben von *H. S. Rzepa, C. Leach* und *J. M. Goodman* Royal Society, Cambridge, 1996. CD-ROM 50.00 £.—ISBN 0-85404-899-5

Es ist soweit: Konferenzen finden ab jetzt virtuell statt. Schluß mit den langen Reisen nach Tokio, Rom oder Jerusalem, um dort mit Fachkollegen neue Ideen zu diskutieren. Dank Internet kann man nun vom Schreibtisch oder gar von zu Hause aus per Laptop an Konferenzen teilnehmen. Ganz so weit ist es natürlich noch nicht, keine Angst. Der Begriff „Electronic Conference“ läßt zwar zunächst auch an solche Folgen der Nutzung neuer Medien denken, doch um es vorweg zu nehmen: Die elektronische Konferenz ist vor allem als Ergänzung und als ideale Dokumentation einer wirklichen Konferenz geeignet.

Für die Zunahme der Zahl elektronischer Konferenzen in den letzten Jahren war vor allem folgender Punkt ausschlaggebend: Das Internet hat sich von einem textorientierten Medium – dazu gehören die klassischen Dienste wie E-Mail, telnet und ftp – zu einem multimedialen Netz (WWW) gewandelt. Gerade in den Naturwissenschaften hat dieser Wandel neue Wege für die Datenverarbeitung eröffnet. Vorträge, Poster und Diskussionen einer Konferenz können nun komplett elektronisch festgehalten und ohne Informationsverlust im HTML-Format (hypertext markup language) transportiert werden. Dreidimensionale Molekülmodelle, in den Text eingebettet, lassen sich am Bildschirm bewegen und frei drehen. Dynamische Prozesse kann man visualisieren, Spektren können gestaucht, ge-

streckt oder sonst wie editiert werden, und so weiter. Das HyperText-Transfer-Protokoll (HTTP) ermöglicht das Laden der Dokumente von beliebigen Rechnern im Internet, und zwar unabhängig vom Betriebssystem oder von der Rechnerplattform. Voraussetzung für all diese Möglichkeiten: Das Plug-in des Client-Browsers „zu Hause“ erkennt die standardisierte Datenstruktur der jeweiligen Anwendung.

Einer der Pioniere auf dem Gebiet der Standardisierung chemischer Information, Dr. Henry S. Rzepa vom Imperial College in London, und zwei Kollegen, Dr. Jonathan M. Goodman vom Department of Chemistry der University of Cambridge sowie Christopher Leach, ebenfalls vom Imperial College, haben in der Zeit vom 12. Juni bis 7. Juli 1995 die erste „Electronic Conference on Trends in Organic Chemistry: ECTOC-1“ organisiert. Eine CD-ROM-Version der Konferenz ist, herausgegeben von der Royal Society of Chemistry (ISBN 0-85404-899-5), erschienen. Die Kongreßbeiträge gliedern sich in 6 Keynote Papers und 71 Artikel, die neuere (Stand: Mitte 1995) Ergebnisse auf den Gebieten der synthetischen, mechanistischen und biologischen Chemie vorstellen. Insgesamt sind Autoren aus 13 Ländern vertreten.

Schon beim Lesen der Keynote Artikel erkennt man die Vorteile der HTML-Sprache. Durch „anklicken“ von wichtigen zweidimensionalen Valenzstrichformeln kommt man zu einer frei drehbaren Visualisierung des Moleküls, was bei komplizierteren Strukturen außerordentlich hilfreich ist. Die 3D-Strukturen sind dabei mit ihren kartesischen Koordinaten im Format der Brookhaven Protein Database (*.pdb files) abgelegt. So kann man sich die zentrale Struktur der Präsentation „A New Synthetic Route to the Illudin and Pterodin Family of Sesquiterpenes“ von Albert Padwa, Erin A. Curtis, Vincent P. Sandanayaka und M. David Weingarten vom Department of Chemistry, Emory University, in Atlanta, von allen Richtungen in vielen verschiedenen Darstellungen (als Drahtmodell, Stäbchenmodell, Stäbchen-Kugel-Modell,

raumfüllend etc.) betrachten. Dieser Struktur liegen die Koordinaten der Röntgenstrukturanalyse einer Vorstufe zum Illudin, die bereits alle fünf Substituenten des späteren Benzolringes in der korrekten Regiochemie trägt, zugrunde. Über die 3D-Präsentation hinaus, und nun zeigt sich die eigentliche Neuerung des HTTP-Ansatzes, lassen sich die Daten editieren. Sobald man die Koordinaten der Röntgenstrukturanalyse lokal auf der eigenen Festplatte gespeichert hat, steht einer Weiterverarbeitung, z. B. Energieberechnungen, nichts im Wege.

Der Beitrag „Studying Perturbation Theory with Explorer EyeChem and VRML“ von Guillermo A. Suner, Omer Casher und Henry S. Rzepa geht in der Visualisierung noch einen Schritt weiter. Die semiempirisch (AM1) berechneten Übergangsstrukturen zahlreicher Diels-Alder-Reaktionen sind in die VRML-Sprache (Virtual Reality Modeling Language) übersetzt worden. Man kann sich somit in den berechneten Übergangsstrukturen bewegen und die Überlappung der Grenzorbitale studieren. Vor allem im didaktischen Bereich eröffnen sich hier ganz neue Perspektiven, im wahrsten Sinne des Wortes.

Die meisten anderen Beiträge beschränken sich auf HTML-Text und Graphiken im GIF-Format. Dabei werden viele Bereiche der Organischen Chemie abgedeckt. Das Spektrum reicht von neuen Naturstoffsynthesen und enantioselektiven Katalysen über die Chemie der Fullere (hier wären pdb-Koordinaten ideal gewesen) bis zu Beiträgen über neue Materialien mit nichtlinear optischen Eigenschaften oder rein theoretischen Studien. Die komplette Liste der Diskussionsbeiträge zu den Präsentationen sowie die Teilnehmerliste (teilweise mit Photographien) runden das Werk ab und machen die CD-ROM zu einer gelungenen Dokumentation. Das klassische „Book of Abstracts“ im Hardcopy-Format wird die nächsten fünf Jahre wohl nicht überleben.

Jörg Grunenberg
Institut für Organische Chemie
der Technischen Universität Braunschweig