



## Standards für die Thermochemie

Das vom National Institute of Standards (NIST) der Vereinigten Staaten erstellte *Chemistry Webbook* ist die Internet-Version einer sorgfältigen und umfassenden Sammlung thermochemischer Daten gasförmiger neutraler und ionischer Verbindungen.<sup>[1]</sup> Die neueste Version vom Juli 2001 enthält Daten von mehr als 40000 Verbindungen; leider sind bisher jedoch nur wenige metallorganische Verbindungen enthalten. Für themenspezifische Suchen sei auch auf die aktuelle Übersicht von Ervin verwiesen.<sup>[2]</sup>

Die Benutzeroberfläche des *Webbook* ist einfach und übersichtlich gestaltet; auf nur die Übertragungszeiten verringernde Schnörkel wurde offensichtlich bewusst verzichtet. Einfache und effiziente Suchalgorithmen erlauben einen raschen Zugriff auf die bemerkenswert umfangreiche Datenbank. Eine leis-

tungsfähige Verbindung in die USA vorausgesetzt sind Recherche und Datenübertragung im Regelfall innerhalb weniger Sekunden beendet. Nur Spektren und Diagramme dauern etwas länger. Das wichtigste Suchkriterium ist sicherlich die Summenformel, doch erlaubt das *Webbook* auch die gezielte Suche nach bestimmten Eigenschaften (z.B. Ionisierungsenergien, Elektronenaffinitäten), CAS-Nummern oder Trivialnamen; auch eine graphische Schnittstelle zur Eingabe von Strukturen steht zur Verfügung. Manche der Optionen sind jedoch nur von eingeschränktem Nutzen, da sich nicht alle in der Datenbank enthaltenen Spezies derart klassifizieren lassen (z.B. Van-der-Waals-Komplexe). Über klar strukturierte Suchmasken gelangt man rasch zu den gewünschten Einträgen in der Datenbank, die von thermochemischen Eigenschaften in der kondensierten Phase bis hin zur Ionenchemie reichen. Zudem ist der Zugriff auf mehr als 10000 Massenspektren möglich. Alle Einträge sind sorgfältig zitiert und die Zitate untereinander verknüpft.

Auf der Suche nach Fulven führt die Eingabe der Summenformel  $C_6H_6$  in die Suchmaske zu einer Liste mit 16 Isomeren; ionische Spezies können zusätzlich angezeigt werden. Diese Liste enthält den Eintrag für Fulven mit Name, Formel und Struktur. Nach Auswahl des Moleküls werden die verfügbaren Daten angezeigt (Abbildung 1), die in diesem Beispiel vom Siedepunkt bis hin zur Ionisierungsenergie reichen.

Neben dem Lob auch etwas Kritik.

Bedauernswert, aber bei der Fülle vielleicht unvermeidbar sind einige Unstimmigkeiten der Daten. Beispielsweise werden für das Difluorcarben Bildungsenthalpien angegeben, die beide aus mehreren Dekaden zurückliegenden Messungen stammen. Ohne eine Begründung für die getroffene Auswahl wird der aktuellere Wert<sup>[1]</sup> nicht angegeben, obwohl dieser auch durch kürzliche theoretische Studien

unterstützt wird.<sup>[3]</sup> Auch die vor einigen Jahren bestimmte präzisere Bildungsenthalpie des Phenylradikals<sup>[4]</sup> ist noch nicht aufgenommen. Zwar gibt es auf jeder Seite ein Formular für Fehlermeldungen, meine bisherigen Hinweise führten jedoch nie zu irgendeiner Reaktion. Weniger störend sind die oft fehlenden Fehlerangaben und Werte für 0 K, teilweise inkonsistente Nomenklatur (z.B. 1,2- und 1,3-dimethylbenzene versus *p*-xylene beim 1,4-Isomer) und falsche Strukturformeln (z.B. zeigt der Eintrag für Thioacetone die Formel von Thiopropanal).

Schlagen Sie eine Web-Site für diese Rubrik vor:  
[angewandte@wiley-vch.de](mailto:angewandte@wiley-vch.de)

Zusammengefasst erlaubt das *Webbook* einen benutzerfreundlichen, rationalen Zugang zu einer umfangreichen Datensammlung, die von hohem Wert für thermochemische Betrachtungen ist. Wie jede Datensammlung ist das *Webbook* jedoch nicht frei von Übertragungsfehlern oder systematischen Fehlern. Haben beispielsweise mehrere Gruppen einen systematisch „falschen“ Wert für eine bestimmte Verbindung publiziert, kann es geschehen, dass ein einzelner „richtiger“ Wert bei der Datenbewertung verworfen wird. Selbstredend kann dafür nicht das NIST verantwortlich gemacht werden, doch sollte die Originalliteratur hinzugezogen werden, sobald außergewöhnliche Differenzen auftauchen.

Detlef Schröder  
 Technische Universität Berlin

**NIST** Standard Reference Data Program Online Databases Chemistry WebBook

### Fulvene

- Formula:  $C_6H_6$
- Molecular Weight: 78.11
- CAS Registry Number: 497-20-1
- Chemical Structure:

This structure is also available as a 2d Mol file or as a computed 3d Mol file.

- Other Names: 1,3-Cyclopentadiene, 5-methylene.
- Notes / Error Report
- Other Data Available:
  - Gas phase thermochemistry data
  - Phase change data
  - Reaction thermochemistry data
  - Gas phase ion energetics data
- Switch to calorie-based units

Abbildung 1. Fulven-Daten im Chemistry Webbook.

- [1] S. G. Lias, J. E. Bartmess, J. F. Liebman, J. L. Holmes, R. D. Levin, W. G. Mallard, *J. Phys. Chem. Ref. Data* **1988**, 17, Suppl. 1.
- [2] K. Ervin, *Chem. Rev.* **2001**, 101, 391.
- [3] A. Ricca *J. Phys. Chem. A* **1999**, 103, 1878.
- [4] G. E. Davico, V. M. Bierbaum, C. H. DePuy, G. B. Ellison, R. R. Squires *J. Am. Chem. Soc.* **1995**, 117, 2590.

Für weitere Informationen besuchen Sie:  
<http://webbook.nist.gov/chemistry/>  
 oder nehmen Sie Kontakt auf mit  
[webbook7@reaction.nist.gov](mailto:webbook7@reaction.nist.gov)