



Organic Syntheses per Mausklick

Die jährlich erscheinenden Bände von Organic Syntheses (und die daraus entstandenen Collective Volumes) gehören sicherlich zu den wertvollsten Werken jeder chemischen Fachbibliothek. Ist doch das (Kunst-)Handwerk der präparativen Organischen Chemie kaum an einer anderen Stelle so explizit und zuverlässig dokumentiert wie in diesen Sammlungen überprüfter Synthesevorschriften. Die detaillierte Darlegung relevanter Details von der Reinigung der einzusetzenden Ausgangschemikalien über apparative und operative Feinheiten bis hin zu Sicherheits- und Entsorgungsaspekten garantiert ein Höchstmaß an Zuverlässigkeit und Reproduzierbarkeit. So haben Generationen von Chemikern die gedruckten Bände von Organic Syntheses meist schon im Studium kennen (und schätzen) gelernt – und zwar nicht nur zum Nacharbeiten konkreter „Kochvorschriften“, sondern auch als Fundgrube und Inspirationsquelle bei der Planung und Durchführung von Synthesen.

Die stetig wachsende Zahl und Vielfalt der in Organic Syntheses beschriebenen Transformationen und Synthesemethoden hat in den letzten Jahren das Recherchieren in diesem Werk immer aufwändiger werden lassen – trotz der Collective Volumes und eines im Jahre 1976 erschienenen Sammelregisters. So kann es als glücklicher Umstand gewertet werden, dass die gesamten Organic Syntheses im Internet zugänglich und recherchierbar sind. Diese elektronische Version, die von Wiley in Zusammenarbeit mit DataTrace und Cambridge-

Soft produziert wurde, umspannt sämtliche 79 Jahresbände einschließlich der Collective Volumes 1–9. Benötigt wird Netscape Communicator 4.7 und das neueste ChemDraw-Plugin, das kostenlos aus dem Internet geladen und installiert werden kann.

Wenn die technischen Voraussetzungen erfüllt sind und der Browser die Website ohne Fehlermeldung geöffnet hat, ist es ein Vergnügen mit den elektronischen Organic Syntheses zu arbeiten. Die Suchoptionen erlauben ein rasches Auffinden von Informationen. Wer nach einfachen Begriffen suchen möchte, dem sei die Option „Simple Query“ empfohlen, mit der man (gegebenenfalls auch unter Nutzung von Operatoren wie „and“, „or“, „near“ oder „and not“) sehr leicht nach Reaktionstypen, Reagenzien, oder auch nach zusammengesetzten Stichworten wie „kinetic resolution“ suchen kann. Die Option „New Query“ erlaubt die (auch kombinierte) Suche in verschiedenen Feldern (Titel, Autor, Summenformel, systematischer Name, Band- und Seitenzahlen usw.), vor allem aber nach Strukturen und Substrukturen.

Wer mit der gewohnten ChemDraw-Oberfläche (Abbildung 1) eine Struktur oder Reaktion gezeichnet und auf „search“ gedrückt hat, wird mit Freude feststellen, dass ihm das Programm sofort eine Liste mit Überschriften (samt Formelschemata, wenn gewünscht) liefert. Durch einfaches Anklicken können dann die detaillierten Vorschriften samt der Grafiken auf dem Bildschirm geholt und bei Bedarf ausgedruckt werden. Durch die vielen aktiven Verknüpfungen (man braucht z. B. nur auf ein einmal gefundenes Reagenz zu klicken um sämtliche Vorschriften zu finden, in denen dieses Reagenz verwendet wird) lassen sich Querverbindungen „in Echtzeit“ rasch aufspüren, die klassisch nur mit erheblichem Zeitaufwand gefunden worden wären. Die Kombination von Suchoptionen erlaubt sogar Recherchen, die mit einem Register gänzlich unmöglich wären. Auch die Option „Browse reactions“ ist in vieler Hinsicht interessant, denn auf Basis einer Liste mit den verschiedensten Reaktionstypen kann man Vorschriften durchblättern.

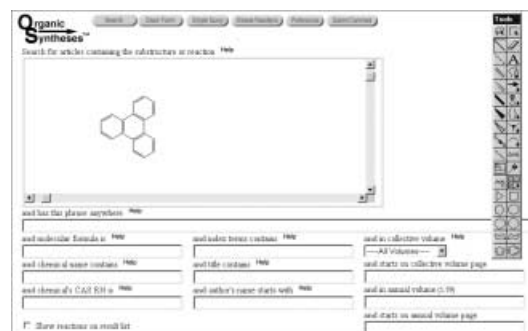


Abbildung 1. Suchmaske in Organic Syntheses mit ChemDraw-Plugin.

Lobenswert sind auch die in roter Farbe hervorgehobenen Sicherheitshinweise, die allerdings leider nicht immer auftauchen, vor allem nicht in den älteren Vorschriften. So fehlt z. B. bei der Herstellungsprozedur für MONOCHLOROMETHYL ETHER (*Coll. Vol. 1*, 377) der Hinweis auf die außergewöhnliche Toxizität und Carzinogenität dieser Verbindung. Auch in der deutlich jüngeren Vorschrift für (*S,E*)-1-(METHOXYMETHOXY)-1-TRIBUTYLSTANNYL-2-BUTENE (*Vol. 77*, 98) wird zwar auf die Gefährlichkeit von Zinnverbindungen hingewiesen, nicht aber auf die des o. g. Reagenzes.

Wer einmal die elektronische Version von Organic Syntheses kennen gelernt hat, wird sie als ein wertvolles Online-Werkzeug nutzen und mit bestem Gewissen weiterempfehlen wollen – gerade auch an Studierende. Da diese Web-Ressource intensiv von Java gebraucht macht und nicht völlig frei von Programmierfehlern zu sein scheint, muss man allerdings darauf gefasst sein, dass der Browser seine Grenzen findet und plötzlich nichts mehr so recht funktioniert. In diesem Fall hilft meist nur ein Neustart des Programms – und ein Lächeln: darüber, dass eine solch wertvolle Datenbasis im Internet frei zugänglich und kostenlos verfügbar ist. Man mag sich natürlich fragen: Wie lange noch?

Juraj Velcicky, Hans-Günther Schmalz
Institut für Organische Chemie der
Universität zu Köln

Für weitere Informationen besuchen Sie:
<http://www.orgsyn.org/>