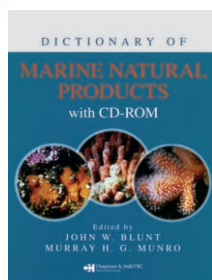




## Dictionary of Marine Natural Products



With CD-ROM.  
Herausgegeben  
von John W. Blunt  
und Murray H. G.  
Munro. Chapman &  
Hall/CRC, Boca  
Raton 2007.  
2536 S., geb.,  
595.00 \$.—ISBN  
978-0-8493-8216-1

Das vorliegende *Dictionary of Marine Natural Products* listet über 30000 Einzelverbindungen aus dem marinen Habitat auf und erscheint hier in Buchform als Teil der umfassenden, seit 25 Jahren fortgeführten Naturstoffdatenbank *Dictionary of Natural Products* des Chapman-Verlags, die inzwischen mehr als 300000 Verbindungen umfasst. Entsprechende Handbücher über Alkaloide, Antibiotika etc. sind bereits erschienen. Im Vorwort geben die Herausgeber an, dass die Einträge des Hauptwerks im vorliegenden Spezialband um zahlreiche Angaben zur natürlichen Herkunft ergänzt wurden. Da der Begriff „Marine Naturstoffe“ nicht leicht abzugrenzen ist, wurde die Sammlung auf Produkte eindeutig mariner Herkunft eingegrenzt, wobei die Literatur bis Mitte 2006 berücksichtigt wurde. Die beiden Herausgeber, die Neuseeländer J. W. Blunt und M. H. G. Munro, sind ausgewiesene Kenner der Materie und haben zudem schon eigene Datenbanken auf diesem Sektor erstellt.

Das eigentliche Handbuch ist 2415 Seiten stark, hinzu kommen 159 Seiten Einführung mit ausführlichen Hinweisen zur Benutzung des Handbuchs und der Bedienung der Datenbank, zur ver-

wendeten Nomenklatur, zur Klassifikation der marinen Organismen etc.

Die marine Welt ist ungeheuer komplex und von immenser Biodiversität, und man kann zu Recht sagen, dass sich die Erforschung auch der chemischen Diversität dieses Teils der Natur zu einem der aktuellsten Gebiete der Naturstoffchemie entwickelt hat. Festzuhalten ist dabei, dass die von marinen Organismen produzierten Metabolite in ihren Grundstrukturen denen terrestrischer Herkunft analog sind – davon kann man sich schon durch bloßes Blättern im umfangreichen Handbuch überzeugen. Dennoch weist die spezifische Ausprägung der Chemodiversität Unterschiede auf, die auf die unterschiedlichen Lebensbedingungen (z. B. unterschiedliche Konzentrationen an Halogenen, Chalkogenen und Metallen) und Enzymausstattungen zurückzuführen sein dürften. Jedenfalls haben es Verlag und Autoren der Mühe Wert gehalten, die chemische marine Welt mit vorliegendem Band gesondert zu behandeln.

Mehr noch als bei terrestrischen Metaboliten stellt sich bei marinen Naturstoffen stets die Frage, ob sie von den untersuchten marinen Tieren und Pflanzen oder den darin mutualistisch oder symbiotisch lebenden Mikroorganismen (z. B. Pilzen oder Bakterien) produziert werden. Erst ein sehr geringer Teil der marinen Mikroorganismen dieser Art ließ sich kultivieren, um so die Quelle der isolierten marinen Naturstoffe aufzuspüren. Zur Klärung dieser Frage wird auch zunehmend die Gentechnik eingesetzt. In anderen interessanten Fällen ließ sich klar nachweisen, dass neue Naturstoffe durch Verstoffwechselung von Nahrungsbestandteilen produziert werden, mehr noch als das vielleicht bei terrestrischen Produkten der Fall ist.

Im Handbuch sind die einzelnen Verbindungen alphabetisch, meist nach Trivialnamen angeordnet, wobei jeder Eintrag eine Eintragsnummer hat. Einer allgemeinen Gliederung folgend werden der systematische Name (Chemical Abstracts, IUPAC), die Chapman-Hall-Eintragsnummer, die CAS-Nummer, die chemische Struktur einschließlich der Stereochemie (soweit bekannt), die Summenformel, das Molekulargewicht, der Name des produzierenden Organis-

mus sowie ausgewählte physikalische (Schmelzpunkt, Siedepunkt, optische Drehung,  $pK_a$ -Wert usw.) und spektroskopische Daten aufgeführt. Sehr wichtig ist, dass diese Daten auch in Kombination miteinander sowie mit Bereichsangaben in der auf CD-ROM mitgelieferten Datenbank recherchierbar sind. Falsche IUPAC-Namen in der Originalliteratur wurden korrigiert. Bei voneinander abweichenden Daten haben die Herausgeber versucht, die wahrscheinlich korrektesten Werte anzugeben. Auch Angaben zur Toxizität oder anderen Gefahren, die soweit bekannt von bestimmten Stoffen ausgehen können, fehlen nicht und sind teils auch bei den Literaturangaben erwähnt. In der Datenbank sind diese Sicherheitsangaben rot hervorgehoben. Dabei erlebt man Überraschungen: Bei der Suche nach „abortifacient“ war der einzige Hit „urea“!

Das Problem der bei Naturstoffen auftretenden vielen Derivate und synonymen Namensgebungen wird in den Chapman-Handbüchern durch die aufeinanderfolgende Auflistung bekannter Derivate gelöst, die meist in Kursivschrift hervorgehoben und durch ähnliche Angaben wie die Hauptverbindungen charakterisiert sind. Sehr wichtige Derivate haben auch einen eigenen Eintrag. Auf Benennungen mit gleichem oder sehr ähnlichem Namen – im Naturstoffbereich leider relativ häufig vorkommend – wird mit einem Doppelkreuz hingewiesen. Zum Abschluss folgen chronologisch geordnet die ausgewählten (nicht vollständigen) Literaturangaben mit kurzer Angabe in Klammern („reference tags“), welche spezifischen Daten in den jeweiligen Referenzen angegeben werden (*isol*, *uv*, *ir*, *pmr*, *cmr*, *struc*, *synth*, *tox* etc.) [z. B. Kent, R. A. et al., *Aust. J. Chem.*, 1970, 23, 2325–2335 (*isol*, *pmr*)]. Die Angabe der Derivate und Synonyme ist äußerst hilfreich, um rasch einen Eindruck vom bekannten Derivatespektrum eines Grundgerüsts zu bekommen.

Bei den Literaturangaben wird leider nicht unterschieden, ob sie zur Hauptverbindung oder zu den Derivaten Angaben machen. Die Referenzen sind in Kurzform nur mit dem Namen des Erstautors aufgeführt, der dann auch in der Datenbank der einzig recherchierbare Name ist. Die Strukturen

der Derivate können in der Datenbank meist durch Anklicken auf den Bildschirm geholt werden, wogegen in der gedruckten Ausgabe nur die Hauptstruktur zu finden ist. Im Übrigen sind die Strukturformeln gut lesbar (mit vielleicht etwas zu dünner Strichstärke), einheitlich und ansprechend gestaltet. Zuckerreste sind grundsätzlich in der Haworth-Projektion dargestellt, was einen raschen Vergleich der Stereochemie ermöglicht.

Drei Arten von Stichwortindex dienen zum Auffinden der Einträge im Buch: „Name Index“, „Type of compound Index“ und „Type of Organism Index“, allerdings bietet die Datenbank auf CD-ROM ungleich mehr. Die Datenbank der marinen Naturstoffe (DMNP) lässt sich parallel zur Hauptdatenbank (DNP) installieren. Wird von Festplatte installiert (vorheriges Kopieren der CD-ROM auf die Festplatte), so braucht die CD beim Benutzen der Datenbank nicht mehr eingelegt zu werden. Hinweise auf eine zeitliche Begrenzung der Nutzung, wie beim Erwerb der Hauptdatenbank der Fall, wurden nicht gefunden. Als ein riesiger Vorteil der Datenbankversion kann nicht nur in drei, sondern in nun 35 Registern gesucht werden, die sich aus einer Liste bequem anklicken lassen. Die Suche kann durch Boolesche Operatoren (and, or, not) und Bereichsoperatoren (<, >, ≤, ≥, -) eingeschränkt werden. Dies ist z. B. bei Parametern wie dem Schmelzpunkt, für die sich in der Literatur oft recht unterschiedliche Angaben finden, äußerst sinnvoll.

In einem Fallbeispiel führte die Suche nach einem Schmelzpunkt (manchmal Fp, manchmal Mp genannt) im Bereich 200 – 202 (mit Leerzeichen vor und nach –, sonst wird es als Minuszeichen interpretiert) und einem Molekulargewicht über 200 (> 200) zu 208 Treffern. Mit präziseren Angaben, z. B. 202 – 205°C und Masse 300 – 301, erhält man einen einzigen Treffer für

den Haupteintrag Neocomantherin mit der Masse 314.337. Der eigentliche Treffer ist aber nicht diese Verbindung, sondern das Desmethylderivat mit dem Molekulargewicht 300.31. Da dieser Treffer nicht farbig hervorgehoben wird, muss man hier gelegentlich etwas suchen. Diese Art der kombinierten Suche mit Bereichsangaben bestimmter physikalischer Daten ist einer der besten Wege für die Suche nach bekannten Naturstoffen, wenn einige Daten eines neu isolierten Naturstoffs vorliegen. In dieser Form ist eine solche Suche z. B. in den *Chemical Abstracts* nicht möglich. Leider kann man nicht nach bestimmten NMR- oder IR-Daten suchen, nur nach UV-Maxima.

Nach Erstautoren sucht man am besten aus dem Referenz-Index. Alternativ muss man AUTH = vor den Autornamen setzen, z. B. AUTH = Faulkner (16 Treffer). Eine Trunkierung ist nicht notwendig. Bei der Suche nach der exakten Molekülmasse müssen alle sechs Dezimalziffern angegeben werden, wobei auch eine Trunkierung bei Angabe von weniger Ziffern nicht hilft. Namen von Organismen, die oft mehrere Bestandteile haben, lassen sich nach den Einzelnamen suchen. Die Suche in den Registern wird dadurch erleichtert, dass die vollen Suchnamen bei Eingabe der ersten Buchstaben unter „add term“ in der Liste erscheinen. Wie bei allen Datenbanken wird sich der volle Nutzen erst nach einiger Zeit des Ausprobierens entfalten. Die Liste der Namen (meist Trivialnamen, gelegentlich systematische Namen) erscheint auf dem Bildschirm, und durch Anklicken gelangt man zum spezifischen Eintrag, wie er auch in weitgehend ähnlicher Form im Handbuch abgedruckt ist. Die Texte oder markierte Teile davon können per copy/paste in Textverarbeitungsprogramme kopiert werden, was mit den Strukturformeln allerdings nicht möglich scheint. Die Strukturen (und anders als beim Hand-

buch auch die meisten Derivate) lassen sich aber durch Doppelklick auf einen blauen Benzolring auf den Bildschirm bringen.

Die Datenbank bietet Suchmöglichkeiten nach Text oder Graphik, wobei zwischen der Suche nach der exakten Struktur und einer Unterstruktur unterschieden werden kann. Zumindest kleine ChemDraw-Strukturen werden beim Hineinkopieren erkannt, ansonsten kann man Strukturen in drei Formaten importieren (u. a. MDL MOL). Die Suchgeschwindigkeit ist auch bei größeren Strukturen akzeptabel, und meist hat man in weniger als einer halben Minute das Ergebnis. Auch die kombinierte Suche nach Strukturen und Text lässt kaum Wünsche offen, einzig das Fehlen von NMR- und IR-Daten ist zu bedauern.

Eine kritische Frage drängt sich dennoch auf: Ist der Erwerb des Teilbandes *Dictionary of Marine Natural Products* nötig, wenn man auf das Hauptwerk *Dictionary of Natural Products* Zugriff hat? Die Datenbestände des vorliegenden Bandes sind weitgehend auch im Hauptwerk enthalten, wie etliche Recherchen ergaben, auch wenn manche Angaben im Teilband etwas ausführlicher sein mögen. Die acht- bis zehnmal längere Suche nach Strukturen in der größeren Datenbank des Hauptwerks wäre ein Argument. Wegen der kleineren und übersichtlichen Datenmenge wird das Werk Forschergruppen, die auf dem Gebiet der marinen Naturstoffe arbeiten, auf jeden Fall zu empfehlen sein. Das Werk eignet sich auch für Bibliotheken, wo es als Nachschlagewerk zur Verfügung stehen sollte.

Karsten Krohn  
Institut für Chemie  
Universität Paderborn

DOI: 10.1002/ange.200785567