

Die Geschichte des ChemDraw-Projekts

David A. Evans*

ChemDraw · Computergraphiken · Molekülstrukturen ·
Strukturdarstellungen

Professor Norman C. Craig gewidmet

Chemische Hieroglyphen

Organische Chemiker kommunizieren ihre Konzepte gemeinhin durch eine Kombination von Text und graphischen Darstellungen von Molekülen, den Valenzstrukturen.^[1] Diese Form der geschriebenen Kommunikation kann mit der Struktur der Ägyptischen Hieroglyphensprache verglichen werden, die ebenfalls textuelle und symbolbasierte Graphiken (Glyphen) verwendet, um einen bestimmten Gedanken oder eine Aussage mitzuteilen. Die Bedeutung der „chemischen Glyphen“ lässt sich daran ermessen, dass sich zwei Chemiker ohne Weiteres mithilfe von Valenzstrukturen und gebogenen Pfeilen verständigen können, ohne dass sie eine gemeinsame Sprache sprechen müssten.^[2]

Das Leben vor ChemDraw^[3]

Vor der Einführung computerbasierter Strukturzeichensprogramme Mitte der 80er Jahre wurden chemische Graphiken von publikationsfähiger Qualität normalerweise in einer Graphikabteilung der Universität oder des Instituts angefertigt. Mithilfe von Schriftschablonen^[4] wurden Tuschezeichnungen auf Velin, einem Pergamentpapier, aufgebracht (Abbildung 1). Verschiedene Schriftgrößen standen zur Verfügung, fette und kursive Buchstaben erforderten eigene Schablonen und Füller, und Helvetica war die einzige verfügbare Schrifttype. Ringe unterschiedlicher Größe wurden meist mit Fiesers Chemikerdreieck gezeichnet (Abbildung 1).^[5] Nur wenige Studenten fanden dabei die Zeit, sich die technischen Feinheiten der Strukturzeichnung anzueignen. Im Allgemeinen benutzte man Fiesers Dreieck, einen Füller und Abziehlettern, um seine Strukturen zu erzeugen. Abziehlettern von geraden und gebogenen Pfeilen waren gleichfalls überall erhältlich. Insgesamt war das Zeichnen chemischer Graphiken eine arbeitsintensive Tätigkeit, an der man beim Schreiben von Veröffentlichungen und Studienarbeiten aber nicht vorbeikam. Studenten, die zu viel Zeit mit dieser Arbeit zubrachten, riskierten, ihre Forschung im Labor zu vernachlässigen.

Xerox Star^[6]

1981 begann man am Chemie-Department am Caltech mit der Evaluierung eines von der Firma Xerox entwickelten Arbeitsplatzrechners.^[7] Dieser Rechner war seiner Zeit weit voraus. „Star“ bezeichnete die Benutzeroberfläche, die das Prunkstück des Produkts war. Die Oberfläche bot erstmals ein hierarchisches Datei/Ordner-System mit Mausbedienung und einem Vollbild(WYSIWYG)-Monitor für originalgetreues Zeichnen.^[8] Dies waren innovative Attribute, die einige Jahre später in viele der modernen PCs, einschließlich der Macintoshs, integriert wurden.

Letzten Endes entschied sich das Caltech gegen die Einführung eines Star-Rechnerclusters, und Xerox verzichtete auf die Kommerzialisierung dieser Produktlinie. In der Zwischenzeit hatte ich eine Workstation erworben (\$32 000), um mich mit der Star-Benutzeroberfläche vertraut zu machen. Leider waren zu dieser Zeit keine Strukturzeichensprogramme verfügbar.

Umzüge sind gut für die Wissenschaft

Ich war immer der Meinung, dass Professoren es vermeiden sollten, es sich in ihrer Umgebung allzu bequem zu machen. Zu leicht beginnt man, in vertrauten Denkmustern zu verharren. Die Folgen eines Wechsels der Universität — neue Umgebung, neue Kollegen — zwingen einen, die Güte und Ausrichtung der eigenen Forschung neu zu beurteilen. Dies geschah mir bei meinem Umzug vom Caltech nach Harvard im Sommer 1983. Bei meiner Ankunft in Cambridge hatte mir das Chemie-Department vorübergehende Laborräume im Keller der Converse- und Conant-Laboratorien eingerichtet. Die Räumlichkeiten waren bis dahin von der Corey-Gruppe genutzt worden, die neue Labors im Conant Laboratory bezog. Vor Ort begannen wir gleich mit der Einrichtung unserer dauerhaften Labors im dritten Stock des Converse. Professor P. Bartlett (1934–1974) und Professor P. Wender (1974–1982) hatten früher in diesen Räumen geforscht. Unser Arbeitskreis bezog im Februar 1985 die frisch renovierten Labors.

Selena (Sally) Evans^[9]

Meine Frau Sally, die seit zwanzig Jahren als Lehrerin gearbeitet hatte, quittierte ihre Stelle und half mir fortan bei

[*] Prof. D. A. Evans
Department of Chemistry & Chemical Biology
Harvard University, Cambridge, MA 02138 (USA)
E-Mail: evans@chemistry.harvard.edu

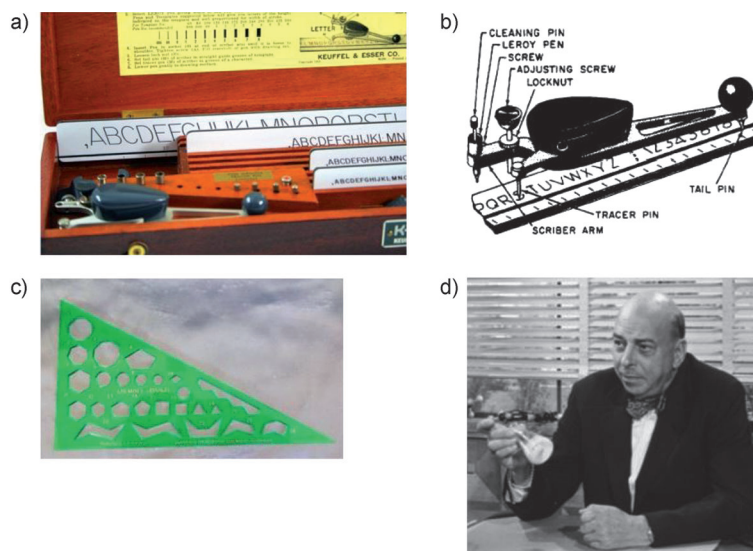


Abbildung 1. Verschiedene Zeichengeräte für chemische Strukturen: a) Leroy-Strukturzeichensatz (Keuffel & Esser Co.), b) Leroy-Zeichenstift, c) Chemiker-Dreieck, entwickelt von Professor Louis Fieser (1899–1977; Portrait in (d)), Harvard University.

der Einrichtung unseres Labors. Sie diente mir als unsere Administratorin, Laborarchitektin und Zeichnerin. Nachdem sie sämtliche Mittel zur Einrichtung des Labors aufgebraucht hatte, kehrte sie in ihren alten Beruf als Lehrerin zurück. Sally hatte am Oberlin College studiert, mit Schwerpunkt auf Lehramt in Naturwissenschaften und Mathematik für Middle- und High-School. Neben der Chemie, die sie im Hauptfach studierte, belegte sie Vorlesungen in Astronomie, Geologie und Physik.

Der Macintosh

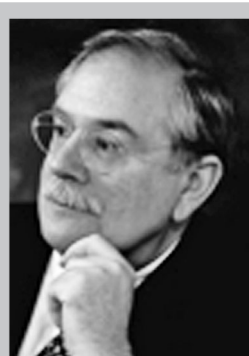
Im Januar 1984 stellte Apple den Macintosh vor, in einem berühmt gewordenen TV-Werbespot während des 18. Super Bowls. Am Ende des Spots sagte eine Stimme aus dem Off: „Am 24. Januar wird Apple Computer den Macintosh einführen. Und ihr werdet erkennen, warum 1984 nicht wie ‘1984’ sein wird.“^[10] Kevin Maney schrieb eine Dekade später in einem Artikel in *USA Weekend*: „Zwanzig Super Bowls später sprechen viele Leute aus der High-Tech-Branche davon, dass der Spot und der erste Mac eine inspirierende Rolle für ihren Berufsweg gespielt hat. Es war einer dieser seltenen

Blitzschläge, die eine ganze Generation mobilisieren können – so wie John F. Kennedys Aufruf, einen Mann auf den Mond zu bringen, die Raumfahrtindustrie anstachelte, oder Bob Woodward und Carl Bernstein mit ihrer Watergate-Story, die junge Journalisten in Scharen anzog.“^[11]

Anfang 1985 entschieden Sally und ich, dass wir unseren eigenen Macintosh brauchten; wir kauften einen Mac der zweiten Generation (512 K) für moderate \$3200, einem Zehntel des Preises der Xerox-Workstation. Überraschenderweise hatte der Mac eine Benutzeroberfläche, die der des Xerox Star bemerkenswert ähnelte. In diesem Zusammenhang hatte Steve Jobs Xerox mit Apple-Aktien versorgt, um Zugriff auf die Star-Oberfläche zu bekommen. Während meiner Zeit am Caltech hatte ich leise auf die Entwicklung eines Chemiezeichnensprogramms gehofft. Als ich sah, wie leistungsfähig das Programm MacDraw war,^[12] wurde uns sofort klar, dass es die realistische Möglichkeit gab, ein Programm für das Zeichnen chemischer Strukturen zu vernünftigen Kosten zu entwickeln. Der Mac war die naheliegende Wahl.

Stewart Rubenstein^[13]

Stewart war Doktorand bei Professor E. J. Corey und Teil des LHASA-Projekts.^[14] Er hatte sich im September 1984 ebenfalls einen Mac zugelegt und besuchte uns gelegentlich in unseren Labors. Er begann sich bald für Sallys Strukturzeichnungen zu interessieren. Sie stellte Tintenzeichnungen mithilfe eines Leroy-Schablonensatzes her (Abbildung 1). Ein eher ermüdender Teil dieser Tätigkeit war, dass man in einem Reaktionsschema immer wieder sehr ähnliche Strukturen, die sich nur geringfügig von der Ausgangsverbindung unterschieden, von Neuem zeichnen musste. Mehr als einmal meinte sie, ich solle an weniger komplexen Strukturen als Vancomycin arbeiten!



David Evans studierte am Oberlin College (A.B. 1963) und promovierte 1967 in organischer Chemie am California Institute of Technology bei R. E. Ireland. Anschließend wechselte er als Assistant Professor an die University of California, Los Angeles. 1974 kehrte er an das Caltech zurück, 1983 folgte er einem Ruf an die Harvard University, wo er 1990 Abbott and James Lawrence Professor of Chemistry wurde. Evans erzielte bedeutende Fortschritte bei der Entwicklung von stereoselektiven Reaktionen und deren Anwendung in der Naturstoffsynthese und der asymmetrischen Synthese.

Eines Nachmittags machte Sally ihrem Ärger Luft und meinte zu Stewart: „Wie würdest Du gerne meine Ehe retten wollen?“ Tatsächlich kam die Frage nicht von ungefähr, denn sie und ich hatten uns bereits die MacDraw-Software angesehen, die als ein vernünftiger Startpunkt für ein Mac-basiertes Strukturzeichenprogramm erschien. Es folgte ein Meeting zwischen Sally, Stewart und mir, um die Möglichkeit der Entwicklung eines solchen Programms zu diskutieren. Stewart erklärte sich bereit, die Herausforderung anzugehen. Innerhalb weniger Wochen legte er ein rudimentäres Programm vor, das viele der Schablonen aus Fiesers Dreieck handhaben konnte. In dieser ersten Version wurde die Länge einer Linie oder die Größe eines Rings durch Ziehen mit der Maus festgelegt. Sally meinte, dies sei grandios, aber sie hätte gerne die Möglichkeit, alle Bindungen gleich lang zu machen! Stewarts Antwort: „Warum würdest du das tun wollen?“ So begann unsere gemeinsame Arbeit an einem chemischen Zeichenprogramm. Der beste Rat, den ich Stewart geben konnte, war, dass die Ästhetik der gezeichneten Struktur genauso gut oder besser sein musste als von einem professionellen Graphiker. Von wenigen bemerkenswerten Ausnahmen abgesehen, sind Chemiker recht wählerisch was die Strukturbilder in ihrem Manuskript und ihren Vorlesungsfolien angeht. Hier sind einige der Punkte, die uns beim Erzeugen der verschiedenen Zeichenwerkzeuge wichtig schienen.

Reaktionspfeile

Als Stewart fragte, welche Größen der Pfeilspitzen wir benötigten, gab ihm Sally ein Blatt mit Abziehlettern. Dies diente als Orientierung dafür, wie häufig welche Spitzen für welche Pfeilabmessungen benutzt wurden (Abbildung 2). Als nächstes führten wir gebogene Pfeile und Bögen ein, und schließlich auch frei wählbare Pfeile, die mit der Bezier-Funktion erzeugt wurden (siehe unten).

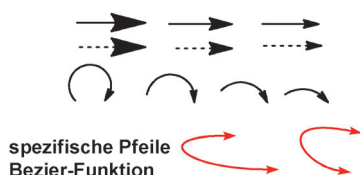


Abbildung 2. Verschiedene Arten von Pfeilen.

Wellenlinien

Da die Strukturen **A** und **B** das gleiche Problem illustrieren — das Fehlen von stereochemischer Information am R-substituierten Stereozentrum — war ich der Meinung, dass die Wellenlinienfunktion nicht wirklich nötig sei (Abbildung 3) und sprach mich deshalb dafür aus, dieses Werkzeug nicht aufzunehmen. Erst als externe Nutzer später dieses Werkzeug erbat, wurde es 1990 einprogrammiert. Wie ich es geahnt hatte, wurde die Wellenlinienfunktion vielfach missbraucht. Die vielleicht ultimative Beleidigung ist eine Struktur mit zwei solcher Wellenlinien am gleichen Kohlenstoff!^[15]



zu vermeidende Strukturen

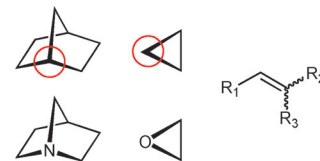


Abbildung 3. Gewellte und kreuzende Linien.

Zusammentreffende Linien

Stewart bemühte sich sehr um das Erscheinungsbild zusammentreffender Linien (Abbildung 3). In vielen der frühen Beta-Versionen von ChemDraw liefen die Linien nicht glatt ineinander, und die richtige Position der Atomsymbole verstärkte dieses komplexe Problem noch.

Atomsymbole

Eine andere beträchtliche Herausforderung waren die korrekten Positionen und Abstände der Atomsymbole. Dies erforderte eine übermäßige Menge Arbeit und war mit dem Apple LaserWriter doppelt schwer zu realisieren.^[16] Solche Herausforderungen werden bei einer oberflächlichen Analyse allzu oft übersehen.

Bezier-Funktion

Bezier-Funktionen wurden in den späten 1980er Jahren aufgrund vieler Anfragen eingeführt. Es gab einen echten Bedarf, die Potentialkurven von Übergangszuständen zu zeichnen (Abbildung 4). Dieses Werkzeug kann auch frei wählbare Pfeile liefern, indem Pfeilspitzen an eines oder beide Enden der Kurve angebracht werden (Abbildung 2).

Erste öffentliche Präsentation

Im Juli 1985 war ich als Sprecher zur Gordon Conference on Reactions and Processes eingeladen. Wir planten, bei dieser Gelegenheit die fortschreitende Entwicklung des

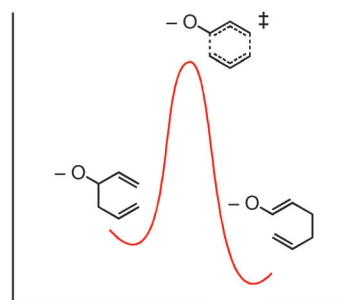


Abbildung 4. Bezier-Funktion für Übergangszustandsdiagramme.

ChemDraw-Programms bekanntzumachen. Mittwoch Nachmittag waren keine Vorträge angesetzt, und Stewart, Sally und ich bereiteten eine Vorführung im Konferenzzentrum in der New Hampton School vor. Wir hatten die ungeteilte Aufmerksamkeit der Teilnehmer, weil es ein Unwetter gab und keiner nach draußen gehen konnte. Wir brachten unsere zwei Macs in das Konferenzzentrum und boten kurze Einführungen in das Programm und praktische Demonstrationen. Es war ein riesiger Erfolg! Ich erinnere mich an viele Einzelheiten dieses Nachmittags – zum Beispiel, dass Scott Denmark fleißig an der Zeichnung eines Dodekaeders arbeitete. Die einzige Kehrseite der Veranstaltung war, dass es Apples LaserWriter noch nicht zu kaufen gab.^[17] Wir brachten stattdessen einen Matrixdrucker mit, der aber nur einen mageren Eindruck von dem bot, was noch kommen sollte. Aber der Funke war gelegt, und die Organikergemeinde fachte die Flamme schnell an.

Im August 1985, während einem meiner regelmäßigen Besuche bei Eli Lilly (Indianapolis), führte ich den Lilly-Chemikern ChemDraw vor. Eine meiner Erinnerungen an den Besuch war, dass wir in der ganzen Firma nur einen einzigen Macintosh ausmachen konnten. Das zweite war die Begeisterung, mit der die Chemiker die ChemDraw-Anwendung empfingen, und in den folgenden Monaten bestellte Lilly Dutzende von Macs.

Beta-Test

Meine Arbeitsgruppe übernahm den Beta-Test des Programms, und in den Jahren 1986–1987 wurden die ersten fünf Dissertationen mithilfe von ChemDraw (CD) geschrieben. In dieser Zeit hatte ich knapp über 20 Mitarbeiter, und die Zusammenarbeit zwischen Mentor und Studenten war intensiv. Das waren harte Zeiten! Wenn beispielsweise jemand mit CDβ-0.48 arbeitete, und die Software war gesperrt, war es nicht möglich, auf das in der Entwicklung befindliche CD-File mit einer älteren Version der Software (CDβ-0.47) zuzugreifen. Der Student musste also warten, bis CDβ-0.49 installiert war, um das in „Geisellhaft“ gehaltene Schema fertigzuzeichnen. Dies trieb jeden zur Raserei, weil Abgabetermine einzuhalten waren. Um persönlichen Schaden zu vermeiden, entwickelte Stewart die Gewohnheit, die Software mindestens einmal am Tag zu aktualisieren, vorzugsweise spät am Abend. Ich nahm kürzlich Kontakt zu Kevin Chapman auf, um ihn nach seinen Erinnerungen an das ChemDraw-Erlebnis zu fragen. Er antwortete: „Willst du O-Töne oder Schimpfnamen?“^[18] Ich hatte diese Probleme nicht vorausgesehen und musste die Situation in meiner Gruppe einige Male bereinigen.

Kommerzialisierung

1985 stellte Sally Stewart einer Anwaltskanzlei vor, die seine Interessen gegenüber dem Harvard Technology Transfer Office vertrat. Harvard verfügte in der Folge, dass es keinen stichhaltigen Zweifel gegen Stewarts Anspruch gab, der Erfinder des Programms zu sein, das heute ChemDraw

genannt wird. 1986 wurde die Firma Cambridge Scientific Computing gegründet. Stewart merkte an, dass „der Name einige Jahre später in CambridgeSoft geändert wurde, nachdem eine andere, größere Firma, CSC (Computer Sciences Corporation), die Verwendung der Initialen beanstandete.“ Es ist von historischem Interesse, dass die erste Person, die eine ChemDraw-Lizenz erwarb, Stuart Schreiber war, damals Assistant Professor in Yale. Ich hatte Stuart auf die Existenz dieses Programms aufmerksam gemacht, und er hatte gesehen, was die frühen Versionen des Programms leisten konnten. Stuart hatte früh an den Beta-Tests teilgenommen. Ich habe ihm einen Entwurf dieses Essays zukommen lassen, und seine Antwort war: „Danke, dass Du Deinen faszinierenden und erhellenden Essay über ein epochales Ereignis in der organischen Chemie mit mir teilst. ChemDraw hat das Gebiet auf beispiellose Weise verändert.“^[19]

Die Verbindung zu Corey

Es gab einiges an Spekulationen in der Chemikergemeinde über den Ursprung von ChemDraw und wem Anerkennung für diese Erfindung gebühre. In retrospektiven Diskussionen dieser Art wird Geschichte oft mit einer Litanei von Behauptungen darüber überfüttert, wer der wahre Erfinder (oder Miterfinder) des Konzepts/der Anwendung ist. In seiner Monographie *The Logic of Chemical Synthesis*^[20] schreibt Corey im Vorwort:^[21] „Das für diese Reaktionen benutzte Programm war ChemDraw, das Mr. Stewart Rubenstein von dem von unserer Gruppe in Harvard in den 1960er Jahren entwickelten und später verfeinerten Molekülgraphikprogramm für den Macintosh-Personalcomputer adaptierte.“

Ich interpretiere diese Aussage so, dass Corey Rubensteins Arbeiten am ChemDraw-Programm als eine Erweiterung seiner eigenen Beiträge zum LHASA-Synthesedesignprojekt ansah und E.J. demzufolge zumindest als Teilhaber fungierte. Obwohl Stewart Coreys Doktorand war, entwickelte Stewart das Programm auf eigene Faust mit seinem eigenen Computer. Bezüglich Coreys Beziehung zum ChemDraw-Projekt stellt Stewart fest, dass „der LHASA-Gruppe Anerkennung für die Entwicklung der Idee gebührt, chemische Strukturen an einem Computerbildschirm zu zeichnen. Während ich an jener Entwicklung überhaupt nicht beteiligt war, zog ich sicher einiges an Inspiration daraus. Die Methoden, die ich für die Ein- und Ausgabe von chemischen Strukturen auf dem Macintosh nutzte, waren jedoch alle originär, eigenständig und in keinsten Weise vom LHASA-Code abgeleitet.“^[22] Das alles ist wahr, E. J. stellte aber die Umgebung und die Expertise bereit, welche die Erfindung überhaupt ermöglichte.

Nach abschließender Prüfung entschied das Harvard Technology Transfer Office, dass Rubenstein der alleinige Erfinder des ChemDraw-Programms ist.

Michael Rubenstein^[23] und Chem3D

Die Entwicklung des zugehörigen 3D-Strukturzeichnensprogramms, Chem3D, begann Ende 1985 durch Michael

Rubenstein, Stewarts jüngerer Bruder. Michael hatte am Oberlin College abgeschlossen und war nach Cambridge gewechselt, um Stewart bei der Gründung von Cambridge Scientific Computing zu unterstützen und an der Entwicklung von Chem3D zu arbeiten. Ich arbeitete ebenfalls mit Michael an diesem Projekt. Meine Rolle bestand darin, Vorschläge für die Verbesserung der Benutzerschnittstelle zu machen. Ich nenne ein Beispiel: Bei der stereoskopischen Darstellung einer Struktur ist der Blickwinkel überaus entscheidend. Je mehr überlappende Atome in der Blickrichtung liegen, desto unübersichtlicher wird die Struktur. Um den optimalen Blickwinkel zu bekommen, riet ich Michael, einen Algorithmus zu entwickeln, der diejenigen Strukturen darstellt, die eine möglichst geringe Überlappung der Atome aufweisen. Er setzte diesen Vorschlag nie in die Software um! So verhält es sich mit jedweder Art von Zusammenarbeit!

Das Leben mit ChemDraw

ChemDraw hat meine Art und Weise des Vorlesungen haltens grundlegend verändert. In der Zeit vor ChemDraw wurden Graphiken produziert und dann an die Photographieabteilung weitergegeben, die Vorlesungsfolien daraus erstellten. Für diesen Schritt wurde eine Vorlaufzeit von einer Woche empfohlen. Sobald man die Folien zur Verfügung hatte, konnte man die Vorlesung zusammenstellen. Heute ist dies alles noch eine Stunde vor der Vorlesung möglich.

Beim Schreiben dieses Essays unternahm ich eine formlose Erhebung zum Gebrauch von ChemDraw in organisch-chemischen Veröffentlichungen basierend auf den *Organic Letters* und dem *Journal of Organic Chemistry*. In *Organic Letters* war in 20/20 der inspierten Manuskripte ChemDraw benutzt worden;^[24] beim *Journal of Organic Chemistry* waren es 19/20.^[25] Auch wenn das natürlich keine gründliche wissenschaftliche Studie ist, lassen die Zahlen doch erahnen, dass ChemDraw das dominierende Graphikzeichenprogramm in der organischen Chemie ist. Bis heute wurden ungefähr 1 000 000 Lizenzen vergeben.^[26]

Nutznieser

Sally und ich hatten kein Interesse, finanziellen Profit aus dieser Kollaboration zu ziehen. Ich empfand Stewart als einen wundervoll talentierten Studenten und genoss die Zusammenarbeit mit ihm! Als unser Weg auseinander ging, war ich Nutznießer eines Strukturzeichenprogramms, das auf meine beruflichen Erfordernisse zurechtgeschnitten war. Sally profitierte ganz enorm, musste sie der Gruppe doch nicht mehr als Graphikerin herhalten! Stewart schließlich gelang es, ChemDraw in der Chemikergemeinde zu vermarkten und eine rentable Firma zu gründen, Cambridge Scientific Computing.^[27]

Auch das Chemiedepartment in Harvard profitierte enorm von der Entwicklung von ChemDraw. Das Projekt signalisierte, dass unser Department wichtige Beiträge für die Chemikergemeinde lieferte. Ich habe diesen Essay geschrieben, um meine wundervolle wissenschaftliche Beziehung mit

Stewart und Michael Rubenstein während meiner frühen Phase in Harvard zu schildern. Dieses gemeinsame Projekt widerlegte auch das lange herrschende Gerücht, dass „die Studenten in Harvard niemals mit den anderen Chemiefakultäten Umgang pflegen.“

Epilog

Eine jüngste Bekanntmachung der American Chemical Society lautet wie folgt:^[28] „*ChemBioDraw Ultra 14 vereint die Vertrautheit und einfache Bedienbarkeit von ChemDraw mit der Leistungsfähigkeit und den maßgebenden Inhalten von SciFinder. Starten Sie eine SciFinder-Suche direkt in der Benutzeroberfläche von ChemDraw und lassen Sie sich direkt zu den Suchergebnissen in SciFinder weiterleiten. Ein Knopfdruck genügt, um eine in ChemDraw gezeichnete Struktur oder Reaktion in SciFinder zu übertragen.*“

Eingegangen am 1. Juni 2014

Online veröffentlicht am 11. August 2014

- [1] S. S. Shaik, P. C. Hiberty, *A Chemist's Guide to Valence Bond Theory*, Wiley-Interscience, Hoboken, 2008.
- [2] W. O. Kermack, R. Robinson, *J. Chem. Soc. Trans.* **1922**, 121, 427–440. Übersichten hierzu: D. O'Hagan, D. Lloyd, *Chemistry World*, **2010**, 7(4), 54–57; S. Alvarez, *Angew. Chem.* **2012**, 124, 610–621; *Angew. Chem. Int. Ed.* **2012**, 51, 590–600.
- [3] Mir wurde empfohlen, diese Einleitung voranzustellen, weil kaum ein Chemiker jünger als 50 ohne ChemDraw aufgewachsen ist.
- [4] Leroy Lettering Sets wurden von Keuffel & Esser Co. hergestellt (Copyright 1950). Die Schablonen waren in der Architektur und im technischen Zeichnen weit verbreitet.
- [5] Das Chemiker-Dreieck wurde seit mindestens 50 Jahre von Sigma Aldrich vertrieben. Vor ChemDraw benutzte es fast jeder Student. Im Allgemeinen sprach man von Fiesers Dreieck, und so nennen wir es auch in diesem Essay.
- [6] Ein Überblick über diese Workstation findet sich bei Wikipedia, Stichwort „Xerox Star“. Siehe auch <http://www.digibarn.com/friends/curbow/star/retrospect/index.html>.
- [7] http://de.wikipedia.org/wiki/Xerox_8010. Das Xerox-Star-System trug die offizielle Bezeichnung Xerox 8010 Information System.
- [8] WYSIWYG steht für „What You See Is What You Get.“.
- [9] S. W. Evans, A. B. Oberlin College, 1963. Bedeutende Lehrtätigkeiten: Westridge School, Pasadena, CA; Westlake School for Girls, Holmby Hills, CA; Dana Hall School, Wellesley, MA; Belmont Day School, Belmont, MA; Montrose School, Westwood, MA.
- [10] Der Spot kann auf YouTube angeschaut werden („Macintosh and the 1984 commercial“): <https://www.youtube.com/watch?v=2zfqw8nhUwA>.
- [11] Kevin Maney, *USA Weekend*, 28. Januar 1984.
- [12] <http://de.wikipedia.org/wiki/MacDraw> MacDraw war eines der Programme, die mit den Macintosh-Computern ausgeliefert wurden.
- [13] Stewart D. Rubenstein: Praktikum bei SUMEX-AIM (Programmiertätigkeiten) 1978–1979; Praktikum bei Hewlett-Packard Life Sciences Group, 1979–1980; B.S. in Chemie, Stanford University, 1980; M.S. in Chemie, Harvard University 1982; President, Cambridge Scientific Computing (later, Cambridge-Soft Corp.) 1986–2006. E-mail: stew@stewrubenstein.com.

- [14] LHASA steht für „Logic and Heuristics Applied to Synthetic Analysis“.
- [15] J. Brecher, *Pure Appl. Chem.* **2006**, 78, 18971. Es gibt etliche Fälle, in denen zwei gewellte Linien für einen tetraedrischen Kohlenstoff empfohlen wurden. Siehe Kapitel ST-0.4 Wavy Bonds.
- [16] Stewart Rubenstein, persönliche Mitteilung, 17. April 2014.
- [17] <http://en.wikipedia.org/wiki/LaserWriter>. Der LaserWriter war Apples erster Postscript-Drucker. Er kam im März 1985 auf den Markt und kostete \$6995, wurde aber deutlich später im Jahr erst ausgeliefert.
- [18] Kevin Chapman, persönliche Mitteilung, 22. April 2014.
- [19] Stuart Schreiber, persönliche Mitteilung, 25. April 2014.
- [20] E. J. Corey, X.-M. Cheng, *The Logic of Chemical Synthesis*, Wiley, Chichester, **1989**.
- [21] E. J. Corey, W. T. Wipke, *Science* **1969**, 166, 178.
- [22] Stewart Rubenstein, persönliche Mitteilung, 20. April 2014.
- [23] Michael C. Rubenstein: A. B. Oberlin College, 1984; Executive Vice-President, Cambridge Scientific Computing, Inc. (später: CambridgeSoft Corp.), 1986–2006; Chief Technical Officer, CambridgeSoft Corp., 2006–2011; Senior Technical Leader, PerkinElmer Corp., 2011; Advanced Leadership Fellow, Harvard University, 2014. E-mail: michaelcrubenstein@gmail.com.
- [24] Clarissa Steinhagen, Managing Editor, *Organic Letters*, persönliche Mitteilung, 27. Mai 2014.
- [25] Katie Turner, Coordinating Editor, *Journal of Organic Chemistry*, persönliche Mitteilung, 27. Mai 2014.
- [26] Hans Keil, Director, Academic Market Segment, PerkinElmer Informatics, persönliche Mitteilung.
- [27] Cambridge Scientific Computing was incorporated in January 1986.
- [28] Craig Stephens, persönliche Mitteilung. Siehe „What’s new in SciFinder“: <http://www.cas.org/products/scifinder/what-s-new-in-scifinder>.