

# Homo Citans und Kohlenstoffallotrope: Für eine Ethik des Zitierens

Roald Hoffmann,\* Artyom A. Kabanov, Andrey A. Golov und  
Davide M. Proserpio\*

Allotropie · Kohlenstoff · Veröffentlichungspraxis ·  
Zitationsethik

Gene Garfield gewidmet

## Auf den Schultern von Riesen

In einem der Klassiker der Gelehrsamkeit „Auf den Schultern von Riesen“<sup>[1]</sup> spürt Robert K. Merton, einer der Großen der Wissenschaftssoziologie, der verwickelten Geschichte einer Bemerkung von Isaac Newton nach: „Wenn ich weiter sehen konnte, so deshalb, weil ich auf den Schultern von Riesen stand“. Mertons Buch ist auch eine humanistische Tollerei, eine köstliche, humoristische Zerlegung der Ansprüche von Gelehrten – einschließlich denjenigen seines Autors.

Merton verfolgt den „Aphorismus“, wie er diese treffende Beobachtung Newtons nennt, zurück bis zu Bernhard von Chartres, und er dokumentiert seine Entdeckungsreise durch eine Ansammlung mehr oder weniger glanzvoller gallischer, jüdischer und angelsächsischer Autoren – bis hin zu Newton und dann darüber hinaus zu Claude Bernard, Bucharin und Freud. Jeder hätte die Quelle dieses verführerischen Gleichnisses zitieren sollen. Einige taten es, andere dachten sich irgendwelche imaginären Ursprünge aus. Und Dritte wiederum versuchten, den Satz einfach als eigene Schöpfung auszugeben und die korrekte Zitierweise herablassend als unwichtig zu betrachten.

[\*] Dr. R. Hoffmann

Department of Chemistry and Chemical Biology, Cornell University,  
Baker Laboratory, Ithaca, NY 14853 (USA)  
E-Mail: rh34@cornell.edu

Dr. A. A. Kabanov, A. A. Golov

Samara Center for Theoretical Materials Science (SCTMS), Samara  
University, Samara 443086 (Russland)

Dr. D. M. Proserpio

Università degli Studi di Milano, Dipartimento di Chimica  
20133 Milano (Italien)  
und

Samara Center for Theoretical Materials Science (SCTMS), Samara  
University, Samara 443086 (Russland)  
E-Mail: davide.proserpio@unimi.it

 Hintergrundinformationen zu diesem Beitrag sind unter <http://dx.doi.org/10.1002/anie.201600655> zu finden.

 © 2016 Die Autoren. Veröffentlicht von Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA. Dieser Open Access Beitrag steht unter den Bedingungen der Creative Commons Attribution-NonCommercial License, die eine Nutzung, Verbreitung und Vervielfältigung in allen Medien gestattet, sofern der ursprüngliche Beitrag ordnungsgemäß zitiert und nicht für kommerzielle Zwecke genutzt wird.

Dennoch hatte der Aphorismus Bestand. Weil er eine physische Tatsache mit einer Wahrheit verband: Selbst wenn wir uns vorstellen (und dabei wünschen, dass andere es anerkennen), dass unser schwer gewonnenes Wissen neuartig ist, besser und tiefer als das, was vor uns kam, können wir nicht umhin zuzugeben, dass es von dem abhängt, was andere vorher getan haben. Die Zitate des Romanautors sind versteckt, Doktoranden müssen sie ausgraben. Der Wissenschaftler ist deshalb zwangsläufig und ausdrücklich *homo citans et citatus*.

In diesem Essay werden wir zuerst einen Blick darauf werfen, weshalb angemessenes Zitieren für das Wohlergehen unserer Wissenschaft unverzichtbar ist. Dann schreiten wir vom Idealfall zu zwei Fallstudien fort, in denen es um fehlerhaftes Zitieren in einem Untergebiet der Chemie und Physik geht, dem der hypothetischen Kohlenstoffallotrope.<sup>[2,3]</sup> Einer dieser Fälle hat es geschafft, in drei Jahrzehnten einen Komplexitätsgrad zu erreichen, für den der „Aphorismus“ acht Jahrhunderte benötigt hat.

Fehler zu finden, ist leicht. Wir wollen aber versuchen, auf zwei Arten darüber hinaus zu gehen. Zuerst wollen wir bodenständige Vorschläge für eine effektivere Literatursuche machen. Und selbst einen Ratschlag dafür geben, was Sie – was Gott verhüten möge! – tun sollten, wenn Sie eine entscheidende Zitation übersehen haben sollten. Und zweitens werden wir – wenigstens für das Untergebiet, das wir hier behandeln – ein der Computerzeit gemäßes Werkzeug vorstellen, mit dessen Hilfe Sie verhindern können, einen Narren aus sich zu machen.

## Warum wir zitieren

Dafür gibt es zahllose Gründe; wir präsentieren eine Auswahl.

1. *Die Tradition der Gelehrsamkeit:* Um Gleichnisse zu mischen, wenn nicht gar Zwerge auf Gigantenschultern zu stellen: Wir sind Glieder einer Kette. Zitieren ist normal, mindestens so alt wie die Faulheit, die oft dahintersteht, wenn wir denjenigen das Ansehen versagen, das sie eigentlich verdienen. Die europäische, afrikanische und asiatische Gelehrtenkultur hat an uns eine Tradition weitergereicht, die sich zu erhalten lohnt. Und nicht nur in Anatarka. Werfen Sie einen

Blick auf die mit Zitaten übersäte Orthographie einer Seite des Talmud (redigiert 600 Jahre nach unserer Zeitrechnung)<sup>[4]</sup> oder in die Schriften des Konfuzius (551–479 v. Chr.), der die älteren Texte des Shang-su (oder Shu-ching, das „Buch der Urkunden“) zitiert;<sup>[5]</sup> die „Kette der Gelehrsamkeit“ ist offenkundig. Anthony Grafton zeichnet in seinem köstlichen Buch „The Footnote: A Curious History“ die Entwicklung des Zitierens in der europäischen Geschichtsliteratur nach, beginnend mit der Renaissance (Deutscher Titel: „Die tragischen Ursprünge der deutschen Fußnote“, dtv, München 1998).

**2. Historie.** Ja, es gibt Neues auf unserer Welt – ein Gramm Buckminsterfulleren, die spezielle Relativität. Aber für alles, absolut alles gibt es Vorläufer, selbst für das genannte Molekül und die Theorie darüber. Wenn wir ethische Überlegungen an dieser Stelle einmal außer Betracht lassen: Wir sind unverfroren und ununterbrochen daran interessiert, wie das Neue entstand. Wissen wird erhalten und wir respektieren das.

**3. Zweckmäßigkeit.** In unseren wissenschaftlichen Publikationen nutzen wir die Messungen anderer. Wir verwenden außerdem ihre Definitionen, Konzepte und Methoden. Es ist uneffektiv, die kalorimetrischen Messungen zu wiederholen, mit deren Hilfe die Wärmeentwicklung beim Verbrennen von – sagen wir: 10 g Ethanol – bestimmt wurde. Oder die Rechnungen über die mittlere Position eines Elektrons in einem Atom mit vielen Elektronen zu wiederholen. Also zitieren wir das NIST Chemistry WebBook, eine elektronische Ressource, die vom National Institute of Standards and Technology vorgehalten wird (das seinerseits experimentell bestimmte Daten zur Bildungswärme des Ethanols zitiert und kritisch miteinander vergleicht).<sup>[7]</sup> Im zweiten Fall fügen wir ein Zitat über Desclauxs klassische Tabellen über atomare Berechnungen ein.<sup>[8]</sup>

**4. Vermeidung von Doppelarbeit.** Wir zitieren, weil wir nicht unnötig das, was vorher getan wurde, wiederholen wollen und sollen. Wir wollen Doppelarbeit vermeiden. Wohlgemerkt: Selbstverständlich müssen sowohl experimentelle Messungen als auch Computerbeweise überprüft werden. Während wir dieses schreiben, erscheint ein Bericht über die Supraleitfähigkeit einer Substanz bei 200 K, die es seit ewigen Zeiten in chemischen Laboratorien gibt: Schwefelwasserstoff. Sie können sicher sein, dass dieses Experiment in mehreren Laboratorien wiederholt wird. Das ist übrigens recht schwierig, ganz anders als z. B. bei Cuprat-Supraleitern.

Die vielgepriesene Reproduzierbarkeit wissenschaftlicher Messungen muss immer wieder auf den Prüfstand gestellt werden. Die „wissenschaftliche Methode“ wird dadurch in keiner Weise verletzt.<sup>[9]</sup>

Sollte die neunte Synthese von Palau’amin publiziert werden? Selbstverständlich, wenn das Synthesenziele auf einem anderen Weg als dem der Erstsynthese erreicht wurde oder sich sonstwie unterscheidet.

Sollte der Entwurf eines Kohlenstoffallotrops, von dem behauptet wurde, dass er beispiellos sei, publiziert werden, wenngleich eine Publikation über dasselbe Allotrop bereits in der chemischen Literatur vorliegt? Diese Frage wird uns in den beiden detaillierten Fallstudien beschäftigen, die wir hier präsentieren. Aber wir wollen uns einem Urteil nicht ent-

ziehen: Nein – es sei denn, die zweite Arbeit vergrößert den Wert des Entwurfs, etwa durch Berechnung einer bestimmten Eigenschaft.

**5. Begründung von Glaubwürdigkeit.** Wir zitieren, damit unsere Fachkollegen sehen, dass wir die Literatur kennen. Dadurch wird der Grund dafür gelegt, dass unsere Entdeckung oder Einsicht als neu und Verständnisfortschritt angesehen wird. „Spinner“-Veröffentlichungen erkennt man am Mangel an Liteteraturzitaten oder an exzessiven Eigenzitaten.

Eine Taxol-Synthese, die nicht Robert A. Holtons Erstsynthese zitiert,<sup>[10]</sup> wird vermutlich nicht zur Publikation angenommen. Das Erwähnen der acht anderen Synthesen, die in Wikipedia gelistet werden, führt in die graue Zone des zu wenig/genau richtigen/zuviel Zitierens. Wenn ein guter Doktorand so weit ist, dass er seine Dissertation schreiben kann, könnte er 90% der Literaturzitate vorhersagen, die in einer Veröffentlichung mit dem Thema seiner Arbeit zitiert werden. Was allerdings kaum Trost ist, wenn sie nicht Mitauteuren der entsprechenden Arbeit sind.

**6. Priorität.** Wir zitieren andere (und auch unsere früheren Arbeiten), um unsere eigenen Forschungen als neuartig zu etablieren, als verschieden von dem, was früher getan wurde.

Hier lauert Gefahr! Wenngleich es eine natürliche Tendenz gibt, die Kraft unserer eigenen Originalität zu bezweifeln (Reden wir über uns selbst?), scheint das Studium der menschlichen Natur in eine andere Richtung zu weisen: Die Menschen neigen dazu, die Qualität dessen, was sie getan haben, zu überschätzen. Wir hassen Publikationen von Autoren, die sich einbilden, ihre eigenen Originalitätsansprüche damit begründen zu können, dass sie das partielle Verständnis, dass ihren Arbeiten vorausging, herabsetzen, dass sie Fehler zitieren, Auslassungen, alles, was nicht geklappt hat. Die Psychologie dieses Verhaltens ist nur allzu durchsichtig: Wenn man selbst wenig zu sagen hat, weist man gerne darauf hin, was andere Menschen falsch gemacht haben. Wer selbst etwas wirklich Neues mitzuteilen hat, verhält sich nie so. Er stellt das vor, was er getan hat.

Dennoch ist Priorität wichtig. Auf den ersten Blick könnte man meinen, dass Prioritätsfragen für die „Wissenschaft“ ohne Belang seien. Wenn Einstein nicht im Jahre 1905 die Gleichung  $E = mc^2$  abgeleitet hätte, hätte das sicherlich schon bald ein anderer getan.<sup>[11]</sup> Oder vielleicht auch nicht so bald... Aber aus psychologischen Gründen ist das aus zwei Gründen eine wenig informierte Sichtweise. Wenn man zum einen die armseligen finanziellen Belohnungen des überwiegenden Teils wissenschaftlicher Forschungen als gegeben betrachtet, so sind die Ideen, die wir haben, und die Moleküle, die wir herstellen, die „Kinder unserer Gedanken“. Als solche sind sie unbelohnbar. Und wenn irgendjemand versäumt, sie zu zitieren, fühlt sich das wie eine Verletzung an.<sup>[12]</sup> Zweitens: die Wahrheiten, die wir sammeln, die Moleküle, die wir herstellen, sind universell. Aber unsere Welt wird durch diejenigen gestaltet, die das Neue erschaffen. Und sie erzielen dieses, indem sie miteinander in einer bestimmten zeitlichen Abfolge wechselwirken. Die Welt ändert sich durch Zufall und die Umstände. Wenn Kekulé uns nicht vor 150 Jahren die Struktur des Benzols gegeben hätte, hätte sich die organische

Chemie in eine andere Richtung entwickeln können, indem sie Moleküle und Reaktionen auf andere Weise betrachtet hätte als wir sie durch unsere chemische Erfahrung kennen.

Priorität zu etablieren, ist also wichtig. Und das besonders wenn praktische Bedeutung, die durch kommerziellen Wert belegt wird, ins Blickfeld kommt. Die Belohnungen sind das beste, was man für Geld kaufen kann. Die Anerkennung der Priorität erfolgt hier über das Patentsystem, ein rechtliches Einverständnis, eine Erfindung auszubeuten im Austausch gegen seine Enthüllung. Leider haben wir hier nicht Platz und Zeit, die faszinierende Logik von Priorität und Zitation in Patenten zu sondieren, die Praxis, Patente zu „prüfen“, um gegebenenfalls frühere Entdeckungen zu finden.

Auch außerhalb des Patentwesens ist die Bedeutung von Entdeckungen manchmal schwierig zu ermitteln. Wir verweisen den Leser auf die faszinierende Geschichte der Entdeckung und Patentierung der Laser,<sup>[13]</sup> oder auch auf die Geschichte der Entdeckung des Sauerstoffs, die Gegenstand eines Theaterstücks von Carl Djerassi und Roald Hoffmann ist.<sup>[14]</sup>

7. „*Einflussangst*“ überwinden. Diese Kategorie schließt sich nahtlos an die vorherige an. Der Ausdruck ist Harold Blooms bemerkenswertem Buch entnommen,<sup>[15]</sup> und wir danken Mario Biagioli für seinen Hinweis darauf.<sup>[16]</sup> Wir sind wandelnde Ansammlungen von Einflüssen – unserer Eltern, unserer Lehrer, der Veröffentlichungen, die wir gelesen haben. Und irgendwie machen wir aus diesem Flickenteppich von Einflüssen – unterstützt vom Wirken des Zufalls – das Neue: ein Molekül, das tatsächlich vorher noch nicht auf der Erde war, eine neue Theorie. Wie können wir „original“ sein, wenn so viel in das hineingeht, was wir tun?

Harold Bloom sah diese Spannung am ausgeprägtesten bei Dichtern, denn ihre Stärke ist ihre Originalität – ganz ähnlich wie bei Wissenschaftlern. Bloom erarbeitete eine Typologie der von Dichtern explizit oder im Unterbewusstsein genutzten Strategien zur Verneinung, zum Ausweichen und ganz allgemein dem Finden von Wegen zur Vermeidung des Einflusses anderer Dichter. Es lohnt sich, über diese Kategorien zu lesen, denn man kann Punkt-für-Punkt Parallelen zu den Erfahrungen zeitgenössischer Chemiker erkennen.

Zitationen erlauben Chemikern, die Einflussangst zu bändigen. Wir zitieren Arbeiten, die „ein Stück weit“ den unsrigen vorangingen. Wir benennen diese Stücke – ob faktischer oder konzeptioneller Natur –, die das, was wir tun beeinflussen. Zugegebenermaßen ziemlich selektiv, und gelegentlich führt uns dieses Verhalten in Schwierigkeiten. Das Netz von rund 50 Zitationen, die für eine typische chemische Veröffentlichung charakteristisch sind, enthüllt diese Einflüsse. Und dient gleichzeitig dazu, die zugrundeliegenden Zweifel des Autors über die Originalität seiner Arbeit zu beschwichtigen.

8. *Die Welt verbinden*. Es ist wunderbar, nicht nur den brillanten Syntheseplan einer organischen Synthese zu erkennen (oder den brillanten Rettungsplan, wenn der ursprüngliche Plan gescheitert ist), sondern auch die Nutzung einer Vielzahl von Synthesemethoden, die hier und da über die chemische Literatur verstreut sind. Und für einen Theoretiker: Was für ein Vergnügen, über eine Denkmethode zu

verfügen, mit deren Hilfe ein oder zwei rätselhafte Probleme verstanden werden können, von denen niemand gedacht hätte, dass sie etwas miteinander zu tun haben. R. B. Woodward spricht hierüber in seiner Cope Lecture,<sup>[17]</sup> und aus dem gleichen Grunde hat Roald Hoffmann seine Nobelvorlesung der Isolobalanalogie gewidmet<sup>[18]</sup> und nicht der Geschichte der Orbitalsymmetriekontrolle chemischer Reaktionen.

9. *Fairness*. Was für altes Konzept, könnten manche sagen. Ist das nicht in der heuchlerischen Klassenstruktur des kolonialen Gentlemans verankert? Keineswegs, Fairness ist wichtig. Am Ende zitieren wir, um fair zu sein. Um die Leistungen derjenigen anzuerkennen, die vor uns kamen. Dahinter steht ein nicht geäußertes Ideal: die gemeinsam geteilte Auffassung eines Corpus verlässlicher wissenschaftlicher Information, der von vielen individuellen Beiträgen errichtet wurde. Und die Freude daran, dass es in einer bedrängten Welt einen Ort gibt, an dem die Dinge ungefähr so sind, wie sie sein sollten. Wissenschaft ist eine Mikrogesellschaft, und es war Merton der für uns beschrieben hat, wie sich diese Gesellschaft von anderen unterscheidet. Eine ihrer grundlegenden Plichten (und Befriedigungen) ist es, dort Anerkennung zu zollen, wo Anerkennung geboten ist. Nach Mario Biagioli ist Wissenschaft auch ein Gemeingut, und Zitationen bilden einen Teil der Gebühren, wenn man es nutzen will.

## Was unsere Journale sagen

Die American Chemical Society hat „Ethical Guidelines to Publication of Chemical Research“ vorgelegt.<sup>[19]</sup> Über das Zitieren heißt es dort:

*„Ein Autor soll die Publikationen zitieren, die die Natur der beschriebenen Arbeit beeinflusst haben und die den Leser rasch zu den früheren Arbeiten führen, die unverzichtbar für das Verständnis der vorliegenden Untersuchungen sind. Außer bei Übersichtsartikeln sollten Zitationen, auf die sich die vorliegenden Arbeit nicht bezieht, so gering wie möglich gehalten werden. Der Autor ist verpflichtet, eine Literatursuche durchzuführen, um die Originalpublikationen zu finden und dann zu zitieren, die nahe verwandte Arbeiten behandeln. Wird für die Arbeit kritisches Material in der Publikation genutzt, sollte auch auf Quellen hingewiesen werden, die von Nichtautoren zur Verfügung gestellt wurden.“*

Die European Association for Chemical and Molecular Sciences schreibt in ihren „Ethical Guidelines for Publication in Journals and Reviews“:<sup>[20]</sup>

*„Autoren haben die folgenden Verpflichtungen:*

*3.1 Wissenschaftliche Daten sollen auf ehrliche Weise gesammelt und interpretiert werden. Herausgeber, Gutachter, Leser und Verleger haben das Recht anzunehmen, dass eingereichte (und publizierte) Manuskripte keine wissenschaftlichen Unehrenlichkeiten und/oder Fälschungen enthalten, u.a. keine frei erfundenen Resultate, plagiiertes Material, Auslassung von Literaturzitaten, falsche Äußerungen zur Priorität, „versteckte“ Mehrfachveröffentlichungen derselben Resultate und falsche Autorenschaft.*

*3.3 Schon publizierte Arbeiten, die mit dem eingereichten Manuskript in Verbindung stehen, sollen durch korrekte Li-*

teraturzitate und Zitationen ihre angemessene Würdigung finden. Alle Quellen sollen angegeben werden und wenn ein signifikanter Anteil der Arbeit Ergebnisse anderer nutzt, soll die Zustimmung des Autors in Übereinstimmung mit den Copyright-Gesetzen eingeholt werden.“

Der Council of Science Editors (CSE) publizierte im Jahre 2006 ein „White Paper on Promoting Integrity in Scientific Journal Publications“, das 2012 in revidierter Form vorgelegt wurde.<sup>[21]</sup> Wir gewannen bei der Lektüre der 81 Seiten des Berichts den Eindruck, dass der CSE von Angst getrieben wird. Was die Literaturzitate anbelangt, enthält das Weißbuch eine ganze Sektion über die Manipulation von Zitaten, aber von einer guten Zitationspraxis ist – so weit wir das erkennen können – nur zweimal die Rede:

*„Der Gutachter sollte sicherstellen, dass eine Beobachtung oder ein Argument, das bereits früher publiziert wurde, von einem einschlägigen Zitat begleitet wird, und soll den Herausgeber sofort darauf aufmerksam machen, wenn er eine Doppelpublikation bemerkt.“*

*„Herausgeber sollen von Autoren fordern, dass diese relevante Material zitieren und referieren, auf dem die eingereichte Arbeit beruht.“*

Dieses sind wohldurchdachte Äußerungen, aber insgesamt enttäuscht das Weißbuch. Kodices und Richtlinien dienen vielerlei Zwecken. Selbst wenn wir wissen, dass Menschen sie verletzen, stellen wir mit diesen Regeln ideales, doch realistisches Verhalten vor. Sie dienen ganz sicher mehr oder weniger rechtlichen Standards, sollte es zu ihrer Überschreitung kommen. Sie haben aber auch einen moralischen und ermahnden Zweck. Wir denken überdies, dass es genauso wichtig ist, jungen Mitgliedern unserer Profession zu zeigen, was richtig und gut ist, wie auch, wo die Grenzen liegen, an denen die Regelverletzung beginnt.

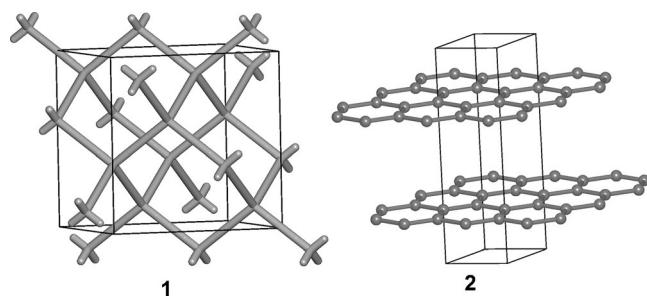
Wir wünschten, unsere Journale sagten mehr. Tatsächlich stellt die Zitationsethik einen Bereich dar, auf dem sich der altehrwürdige Peer-review-Prozess bewährt hat. Wissenschaftler sind Menschen und Menschen sind Menschen, will sagen, sie sind faul, selbst wenn sie anständig sind. Roald Hoffmann hat sich sorgfältig mit nichtbegutachteten Arbeiten beschäftigt, so wie sie z.B. in arXiv<sup>[22]</sup> erscheinen (ein Kommunikationsforum, für das sich Chemiker kaum interessieren, aber das in weitem Umfang von Physikern, Astronomen und anderen genutzt wird). Ihm scheint, dass diese Veröffentlichungen es oft an der Qualität ihrer Illustrationen missen lassen sowie der Fairness und Angemessenheit, mit der sie die Literatur zitieren. Wir postulieren, dass dieses nicht aus Boshaftigkeit geschieht, sondern aus Faulheit. In einem ordentlich begutachteten Journal nehmen die Gutachter den Mantel der Kritik an. Es ist ihre Aufgabe, Mängel zu entdecken, und oft ärgern wir uns darüber, wenn es sich um unsere eigenen Manuskripte handelt, die kritisiert werden. Wenn die Gutachter sorgfältig ausgewählt werden – und es ist das Metier des Herausgebers, das zu tun – dann ist hier der Ort, an dem die Gutachter glänzen können. Sie berichten uns Arbeiten, die wir übersehen haben, über Arbeiten, denen wir mehr Anerkennung hätten zollen sollen. Sie halten die Ethik des Zitierens aufrecht. Und dass die Autoren ihre Zeichnungen und Diagramme verbessern sollen, darauf achten sie auch.

Gebrauch führt zu Missbrauch, das gehört zur conditio humana. Die meisten Zitationssünden sind Unterlassungs-sünden. Aber es gibt auch bewusste Sünden. Wir vermeiden an dieser Stelle eine ausführliche Diskussion von wissen-schaftlichem Fehlverhalten, Fälschung und Plagiarismus.<sup>[23]</sup> Nicht weil wir nicht von ihnen wüssten und nicht, weil sie unwichtig wären. Wir lassen sie unberücksichtigt, weil wir nicht davon abgelenkt werden wollen, zu zeigen, dass richtiges Zitieren wirklich zählt, und dabei helfen wollen, dass die Zitationspraxis vieler Menschen besser wird. Denn, wie Harriet Zuckerman uns schrieb,<sup>[24]</sup> es ist nicht schlecht, Wis-senschaftler an diesen Mehltau zu erinnern, der auf unserem Beruf liegt, ganz zu schweigen von seiner offensären Zu-nahme.

Wenn das Zitieren unser Thema ist, ist es besonders wichtig, dass wir dem Leser eine Auswahl früherer Gedanken dazu präsentieren. Nicht zuletzt um – neben anderen Dingen – zu demonstrieren, wie unoriginell wir sind... Das werden wir tun – aber jetzt ist die Zeit, zu spezifischen Beispielen vorzudringen.

### Kohlenstoffallotrope

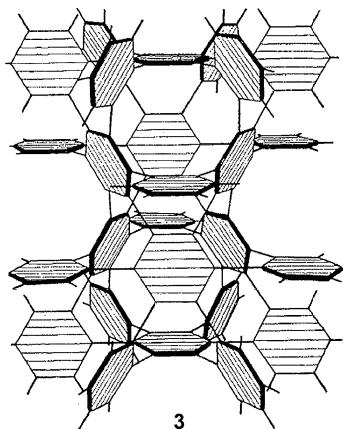
Wir werden uns zunächst mit hypothetischen Strukturen des wohl wichtigsten chemischen Elements beschäftigen: Kohlenstoff. Diamant und Graphit sind seit Jahrtausenden bekannt. Aber es ist gerade einmal 100 Jahre her, dass wir mit Hilfe der Einkristall-Röntgenstrukturanalyse nahezu gleichzeitig die Strukturen und die Maße des kubischen Diamants (**1**)<sup>[25]</sup> und des Graphits (**2**) kennenlernten.<sup>[26]</sup> Graphit ist in hexagonaler und in Bernal-Form bekannt, die durch unter-schiedliche Stapelung von dem entstehen, was wir heute Graphenlagen nennen. Hexagonaler Diamant oder Lonsda-leit wurde einige Jahre später beschrieben, wenngleich seine Existenz in neuerer Zeit in Frage gestellt wurde.<sup>[27]</sup>



Es wurde schon früh deutlich, dass Diamant und Graphit – wenigstens auf dem Papier – tatsächlich nur die ersten Mitglieder einer Familie von Polytypen sind. Die kleinen Dispersionsenergien, die bei der Aggregation von Graphen-lagen auftreten, bedingen eine Anzahl von Stapelungsweisen: AA, AB, ABC usw. Für Diamant, mit seinen starken Bin-dungen zwischen dem, was wir als horizontale Cyclohexan-artige Schichten wahrnehmen (das ist zum Teil eine Illusion, die sich aus unserer Unfähigkeit ergibt, Schichten und wahre Tetraedersymmetrie zu integrieren; es gibt Cyclohexanringe

in Sesselkonfiguration, aber keine ausgeprägten axialen und äquatorialen Bindungen in kubischem Diamant), kann man sich Polytypie gleichfalls vorstellen. Lonsdaleit ist der erste Vertreter einer unendlichen Serie. SiC verkörpert sie in der Realität – mit Gewalt.

Die Neigung der Menschen zur Brandstiftung kennt keine Grenzen. So kennen wir schon lange eine Vielzahl pyrolytischer Kohlenstoffe, die sich der Strukturbestimmung bisher allerdings entzogen haben. Aus dem Studium eines von diesen, kam 1946 H. L. Rileys Struktur **3**<sup>[28]</sup> vermutlich der erste Vorschlag eines hypothetischen Kohlenstoffallotrops.



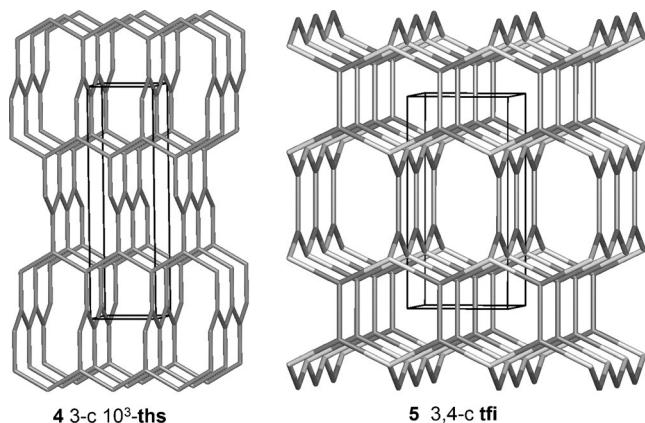
Struktur **3** besitzt offenkundig eine geringe Dichte und ist verhältnismäßig wenig gespannt. Rileys Kohlenstoff, später „Polybenzol“ genannt<sup>[29]</sup> wird bei hohem Druck keine Chance gegenüber Diamant haben. Aber eines Tages werden Chemiker einen pfiffigen Weg finden, ihn bei Normaldruck herzustellen.

Als nächstes Mitglied wirklicher Allotrope kam das Buckminsterfulleren. Ursprünglich nur ein Schimmer in den Augen von Theoretikern (die sich alle gegenseitig nicht zitierten),<sup>[30]</sup> traurigerweise ignoriert, und dann wirklich entdeckt bei Untersuchungen der Kohlenstoffablation in der Gasphase<sup>[31]</sup> und schlussendlich in Substanz hergestellt.<sup>[32]</sup> Heutzutage vergleichsweise preiswert, stellt dieses Molekül das thermodynamisch instabil, aber kinetisch persistent ist, eine wunderbare Verknüpfung von Chemie und Physik dar. Und, natürlich, gibt es die Familie der größeren und ebenso persistenten Fullerene, sowie die Nanoröhren.

Wir wollen die Fullerene keineswegs vernachlässigen, aber uns hier doch auf die dreidimensionalen, unendlichen Netzwerke elementaren Kohlenstoffs beschränken.

Einer von uns (Roald Hoffmann)<sup>[33]</sup> und Ivan V. Stankovich<sup>[34]</sup> begannen in den frühen 1980er Jahren unabhängig voneinander über Kohlenstoffallotrope nachzudenken. Hier zeigen wir zwei Strukturen, die von der Hoffmann-Gruppe vorgeschlagen wurden: **4**<sup>[33]</sup> (zusammen mit Tim Hughbanks, Miklos Kertesz und Peter Bird) und **5**<sup>[35]</sup> (mit Mike Bucknum; weitere Arbeiten über 3,4-verknüpfte Netze mit Ken Merz, Sandy Balaban).<sup>[36]</sup> Wo verfügbar, führen wir fettgedruckte Symbole aus drei Buchstaben für Netze ein (wie von M. O’Keeffe vorgeschlagen)<sup>[37]</sup>, hier **ths** bzw. **tfi**. **Tfi** steht für

three-four-i, und es gibt auch **tfa**, **tfb** usw. Sowohl **ths** als auch **tfi** sind in vielen Koordinationsnetzwerken beobachtet worden. Die Netze in Strukturen **1**, **2**, **3** werden **dia**, **hcb** bzw. **pbz** genannt.



Sobald Rechnungen in einer Basis ebener Wellen für ausgedehnte Systeme leicht durchführbar geworden waren, öffneten sich sozusagen die Schleusentore. Rechnergestützte Chemie und Physik auf einem mittleren Niveau waren immer einfacher als das Experiment. Wir haben mehrere hundert Veröffentlichungen gezählt, in denen „neue“ Kohlenstoffallotrope vorgestellt wurden. „Neu“ in Anführungsstrichen, weil es, wie wir zeigen werden, viele Wiederholungen gab. Und die Titel der Arbeiten, die sie beschrieben, endeten nicht bei „neu“ oder „neuartig“. Erweiterungen wie „superhart“, „erstaunlich stabil“ und „existenzfähig“ schossen ins Kraut. Wir wollen uns nicht in das hineinziehen lassen, was hier getrieben wird: Reklamerummel.<sup>[38]</sup>

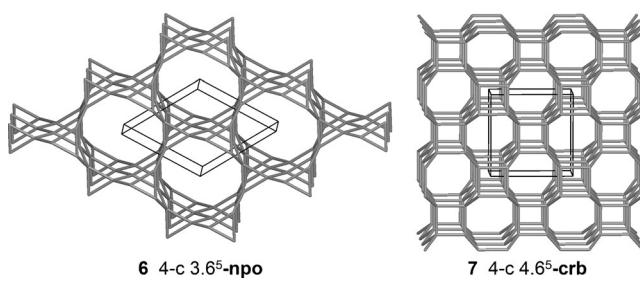
Wir beginnen zunächst mit einer von zwei Fallstudien über „Zitationsamnesie“ auf dem Gebiet der Kohlenstoffallotrope. Wir tun das nur mit Beklemmung, da die Terminologie dieses Untergebiets der Festkörperchemie rasch ins Geheimsvolle wächst. Nimmt man die traurige Verschachtelung unserer molekularen Wissenschaften als gegeben an, baut sich bei der Ausweitung in die dritte Dimension dessen, was sich bei näherer Betrachtung als nicht mehr als die einfachsten Bausteine der organischen Chemie erweist, sehr rasch eine Komplexität auf, die unsere Verstandeskraft einträgt, nicht zuletzt, wenn man auch an die zur Beschreibung der Netzwerke erforderliche Nomenklatur denkt. Uns ist diese Tatsache bewusst, und wir entschuldigen uns beim Leser, dass wir sie Details unterwerfen, die nun einmal zum Verständnis unserer Fälle erforderlich sind (oder auch Mertons „Auf den Schultern von Riesen“). Wir verzeihen Ihnen, wenn Sie den folgenden Abschnitt querlesen.

### Davides Geschichte

Im August 2014, während er mit dem Aufbau einer Datenbank für Kohlenstoffallotrope beschäftigt war, stieß einer von uns (Davide M. Proserpio) auf eine Arbeit in *Phys. Rev. Lett.*, in der ein dreidimensionales Kagome-Gitter (CKL) für

elementaren Kohlenstoff vorgeschlagen wurde, zusammen mit einem strukturell ähnlichen, sich durchdringenden Graphennetzwerk (IGN).<sup>[39]</sup> Die Autoren berichteten nicht die Koordinaten – ein Trend, der in der Literatur über hypothetische Kohlenstoffallotropen recht weit verbreitet ist und dazu führt, dass die Resultate nur schwer reproduzierbar sind –, lediglich die Elementarzelle und einige Bindungslängen. Dennoch war offenkundig, dass das beschriebene 4-verknüpfte Netz dasselbe war wie eines, das hcp-C3 genannt worden war und 1999 von P. A. Schultz, K. Leung und E. B. Stechel aus den Sandia National Laboratories vorgestellt wurde.<sup>[40]</sup>

Dieses Netz enthält kleine Dreiringe und wurde später in dem Zeolith Nitridophosphat-1 beobachtet und NPO genannt.<sup>[41]</sup> Daher der Netzname **npo** in der RCSR-Datenbank (**6**). Durch eine tiefergehende Analyse fanden wir, dass **npo** bereits 1992 als Netz 36 in Abbildung 2 von M. O’Keeffe in seiner Ermittlung uninodaler Netze mit Dreiringen identifiziert worden war, die wiederum auf J. V. Smith im Jahre 1979 zurückgeht (Netz 94 in seiner Abbildung 7), und beide schon 1977 von A. F. Wells als Abbildung 9.15a und 9.16 in seinem bemerkenswerten Buch beschrieben wurden.<sup>[44]</sup>



Die Geschichte beginnt hier erst! Im Jahre 2003 wurde **npo** als eine hexagonale Kugelpackung 4/3/h3 von Sowa, Koch und Fischer in ihren fortlaufenden Forschungen beschrieben, deren Ziel die vollständige Ableitung aller homogenen Kugelpackungen war und in den 1970er Jahren begonnen wurde.<sup>[45]</sup> In neuerer Zeit (2012) wurde **npo** als hcp-C3 reexaminiert.<sup>[46]</sup> Zusätzlich lässt sich das strukturell verwandte IGN (siehe oben) auf ein Netz zurückführen, das als 3,4-bik-Cmcm<sup>[47]</sup> bezeichnet und als ZGM-12 beschrieben wurde.<sup>[48,49]</sup> Tatsächlich konzentrieren sich die Arbeiten über CKL und IGN auf Eigenschaften, die in dem vorangegangenen Bericht über hcp-C3 und ZGM-12 nicht untersucht wurden, aber wie auch immer...

Aber niemand kann sich seiner Sache auf diesem Gebiet sicher sein, denn viele Netzwerke waren bereits bekannt bevor sie als Kohlenstoffallotropen wiederentdeckt wurden. In der Tat wurde in der schon zitierten Veröffentlichung aus dem Jahre 1999 über hcp-C3 über ein raumzentriertes tetragonales Allotrop mit Vierringen als bct-C4 berichtet. Die bibliographische, elektronische Suche war damals viel schwieriger, und P. A. Schultz, K. Leung und E. B. Stechel haben deshalb auch übersehen, dass dasselbe Netz schon früher von R. H. Baughman und D. S. Galvao beschrieben<sup>[50]</sup> und dort als Te-

tra(2,2)tubulan bezeichnet wurde. Es wurde im übrigen von derselbe Gruppe einige Jahre später erwähnt und dann als R<sub>2</sub> bezeichnet.<sup>[51]</sup>

Was ist ein Namen? Dasselbe Netz ist auch als „rechteckiger Kohlenstoff“ bezeichnet,<sup>[52]</sup> mit korrekter Erwähnung der Arbeiten von Baughman; einfach als „D“<sup>[53]</sup> mit keinerlei Zitaten außer einem zu A. F. Wells’ bahnbrechenden Arbeiten (siehe unten); als (2,2)I4/mmm(2)<sup>[54]</sup> ohne spezifische Referenzen.

Nach einigen Jahren der Ruhe riss eine wichtige experimentelle Arbeit über kalt komprimierten Graphit die Theoretikergemeinde aus ihrem Schweigen, und die Struktur erschien erneut in zwei Arbeiten im Jahre 2010: im März als bct-C<sub>4</sub>, mit „echten sp<sup>3</sup>-Kohlenstoffatomen“,<sup>[56]</sup> unter Zitation der Arbeit von Schultz aus dem Jahre 1999 und im Oktober als schlichter „bct-Kohlenstoff“, der mit dem lakonischen Satz vorgestellt wurde: „Diese Struktur scheint der in früheren Studien gefundenen ähnlich zu sein.“ Hierbei wurden die Arbeiten von Schultz (1999) und Strong (2004) zitiert.<sup>[57]</sup> Jetzt setzte ein veritable Schwall an Publikationen ein, in dem die selben Strukturen erneut berechnet wurden (zusammen mit anderen hypothetischen Strukturen). Auch wurde über zahlreiche Eigenschaften berichtet,<sup>[58–68]</sup> ohne dass allerdings die älteren Literaturzitate Erwähnung fanden. Die frühen Arbeiten von Baughman wurden – zusammen mit den Arbeiten von Umemoto (2012) – in lediglich zwei Arbeiten anerkannt.<sup>[69]</sup> Drei weitere Veröffentlichungen zitierten die Arbeit von Schultz aus dem Jahr 1999.<sup>[70]</sup>

Nur eine einzige Gruppe, die von E. A. Belenkov, hat alle Zitate und Atomkoordinaten sorgfältig in einem Buch gesammelt<sup>[71]</sup> sowie in einigen Veröffentlichungen zusammengefasst.<sup>[72]</sup> Sie verwendeten die Bezeichnung LA3 für bct-C<sub>4</sub> und TB für **npo**.

Wendet man sich der eher chemischen Literatur zu, ist es leicht, herauszubekommen, dass das Netzwerk bct-C<sub>4</sub> dort als **crb** bekannt ist (**7**; das Borgerüst von CrB<sub>4</sub> und verwandten Verbindungen).<sup>[73,74]</sup> Im Jahre 1988 wurde es von J. K. Burdett und E. Canadell als ein tetraedrisches Kohlenstoffnetz vorgeschlagen.<sup>[75]</sup> Aber das Netz war dem großen Strukturchemiker A. F. Wells schon wesentlich früher bekannt. Man findet es schon 1954 in seiner zweiten Arbeit der Serie „The Geometrical Basis of Crystal Chemistry“. Dort wird es Net 7 genannt und durch seine Abbildung 6 illustriert.<sup>[76]</sup> Im Jahre 1971 zeigt W. Fischer bei seiner Suche nach tetragonalen Kugelpackungen **crb** als 4/4/t5 in seiner Abbildung 4.<sup>[77]</sup> Und der Zeolith-Fachmann J. V. Smith nennt es Netz 3.<sup>[78]</sup> Im Jahre 1977 berichtet Wells in seinem Buch<sup>[44]</sup> über **crb** als (4.6<sup>5</sup>)-a, zusammen mit **npo**. In dem Absatz, der den Netzen mit dem Punktsymbol m.n<sup>5</sup> gewidmet ist,<sup>[79]</sup> schreibt er:

„Die Netze 3.6<sup>5</sup> und 4.6<sup>5</sup> sind besonders eng verwandt, denn sie bestehen aus zylindrischen ‘Tunneln’, auf deren Wänden planare Sechsecke eingeschrieben sind, wobei drei Tunnel im 3.6<sup>5</sup>-Netz durch Dreiringe verknüpft sind und durch vier Vierecke im 4.6<sup>5</sup>-System. Das letztere repräsentiert die Anordnung der Bor-Atome in CrB<sub>4</sub> [unser **crb**], und 3.6<sup>5</sup> [unser **npo**] entspricht den Positionen der Kugelzentren in der offenen Kugelpackung 4<sub>2</sub> (hexagonale Variante) von Heesch und Laves...“<sup>[80]</sup>

Die beiden Netze sind als Projektionen in Abbildung 9.15 und als Stereobilder von handgefertigten Modellen in dem Zitat von Wells gezeigt (Abbildung 9.16 und 9.17). Die letztere 4<sub>2</sub>-Kugelpackung **npo** wird auch in der zitierten Arbeit von Wells aus dem Jahre 1954 in Abbildung 17 als eine Packung von Tetraedern gezeigt. Wie **npo**, wurde auch **crb** als das zugrundeliegende Netz für ein raumzentriertes tetragonales Tectosilicat mit dem Zeolith-Namen BCT gefunden.

Einige Schlussbemerkungen. Jedem, der auf diesem Gebiet arbeitet, sollte kristallklar sein, dass er wohlberaten ist, zuerst bei Wells nachzuschlagen,<sup>[44,81]</sup> wenn er sich ein neues Netz ausdenkt, oder aber in neueren Datensammlungen wie RCSR.<sup>[37]</sup> Weitere Hinweise auf Netze findet man in Lit. [82]. Will man Netzsammlungen bei der Suche nach Allotropen verwenden, seien Lit. [82,83] empfohlen. Die Geschichte, die wir hier so ausführlich nachgezeichnet haben, erinnert auch an eine, die vor einigen Jahren über ein hypothetisches Kohlenstoffallotrop erzählt wurde,<sup>[84]</sup> dieses Mal war es 3-verknüpft und wurde **srs** genannt.

Wir bemerken außerdem traurig, dass die älteren Originalarbeiten viel weniger zitiert/erinnert werden als die beiden, die im Jahre 2010 das Gebiet aufmischten. Die bis heute gesammelten Zitationen belaufen sich auf 23 für die Arbeit von Baughman und Mitarbeitern (1993)<sup>[50]</sup> und auf 25 für die von Schultz et al. aus dem Jahre 1999.<sup>[40]</sup> Umemoto et al. (2010)<sup>[56]</sup> bringen es auf 124 Zitate und Zhou et al.<sup>[57]</sup> auf 60. Hierbei handelt es sich nicht um Mertons „Auslösung durch Einverleibung“, sondern um etwas anderes.

In summa: Nicht gerade Bernard von Chartres, aber Heesch und Laves im Jahre 1933 (3.6<sup>5</sup>-**npo**) und Wells 1954 (4.6<sup>5</sup>-**crb**).

## Zitate zum Zitieren

Wir wollen Ihnen noch einen anderen Fall präsentieren, aber vorher noch einmal zur Zitationspraxis zurückkehren. Wir sind nicht auf Originalität erpicht, wenn wir beschreiben, warum wir zitieren. Die Praxis des Zitierens an sich ist sehr alt, wie wir schon erwähnt haben. Die exakten Wissenschaften kamen spät zur Zitation und liehen sich ihre Praxis aus schon etablierten Formen des gelehrteten Arguments in der Literatur, dem religiösen Disput und der Rechtspraxis.

Früher gab es Anleitungen zu einer guten Zitierpraxis. Als Beispiel sei erwähnt, was Jacques Barzun und Henry Graff in der 5. Auflage des Buchs „The Modern Researcher“ sagen – die erste Ausgabe im Jahre 1957 hatte denselben Text:

„Obwohl der Forscher nie völlig frei von der Notwendigkeit ist, seine Worte durch Fußnoten zu belegen, ist es nicht der Autor, der die Zahl und Vollständigkeit dieser Anmerkungen bestimmt. Vielmehr werden diese vom vorliegenden Gegenstand und der angenommenen Leserschaft bestimmt. In dem Maße wie Fußnoten einen Teil der Bedeutung eines Textes kommunizieren und seine Verlässlichkeit bescheinigen, sind sie genauso wichtig wie jeder andere Teil einer Arbeit auch. Daher sollte ein Autor ein Urteilsvermögen darüber entwickeln, wann und was als Fußnote erscheinen sollte.“

Alle Zitate, die mehr als beiläufige Sätze oder anonyme Bemerkungen darstellen, erfordern eine Fußnote. Genauso wie

*alle neuen oder überraschenden Behauptungen und alle eigenständigen Teile einer Demonstration oder eines Arguments. Daraüber hinaus: Eine gute Faustregel ist es, einen Hinweis zu schreiben, wann immer man das Gefühl hat, dass eine wache Person neugierig auf die Quelle einer Bemerkung ist.“<sup>[85]</sup>*

Barzun und Graffs Buch, das sich vorwiegend an Geisteswissenschaftler wendet, enthält ein umfangreiches und lesewertes Kapitel über „Die Regeln des Zitierens“, dem die obigen Zitate entnommen sind.

Direkter an Naturwissenschaftler wendet sich E. Bright Wilson mit einem Rat aus seinen 1952 erschienenen Buch „An Introduction to Scientific Research“:

„Eine reichliche Anzahl an Zitaten ist wichtig, um dem Leser den unmittelbaren historischen Hintergrund eines Problems zu vermitteln und frühere Versuche anzuführen, es zu lösen. Hinweise sollten auch zur vollständigeren Beschreibung der verwendeten Apparaturen gegeben werden oder zur Beschreibung von Apparaturen und Methoden, aus denen die nunmehr genutzten sich entwickelt haben. Alle von ‘außen’ übernommenen Messwerte, Tatsachen, Gleichungen oder Argumente sollten durch Literaturzitate belegt werden. Und schließlich sollten alle Veröffentlichungen, die zu ähnlichen oder gegensätzlichen Schlussfolgerungen geführt haben, aufgelistet werden...“

„Was die gesamte Angelegenheit der Würdigung anderer anbelangt, einschließlich eines angemessenen Blicks auf den Hintergrund eines Problems in der Einführung, den Referenzen im Hauptteil und des Verdiensts anderer am Ende einer Arbeit, so ist eine großzügige Haltung am wirkungsvollsten, auch vom rein egoistischen Standpunkt. Wissenschaftler bilden eine Gruppe, die praktisch nie von solchen Menschen getäuscht wird, die sich selbst mit Leistungen anderer nach vorne drängeln. Das Versäumnis, angemessenen Bezug auf die Arbeit anderer zu geben, kann größere Bitterkeit hervorrufen als nahezu jede andere Verhaltensweise.“<sup>[86]</sup>

Eine Broschüre der National Academies über „On Being a Scientist: Responsible Conduct in Research,“ die mittlerweile in ihrer 3. Auflage vorliegt, enthält einen empfehlenswerten Abschnitt über das Teilen von Forschungsergebnissen. Dort steht unter anderem:

„Sobald die Forschungsresultate publiziert sind, können sie von anderen Forschern frei genutzt werden, um das Wissen zu vergrößern. Aber so lange bis die Resultate so weit bekannt und vertraut geworden sind, dass sie zum Allgemeinwissen zählen, sind diejenigen, die sie nutzen, verpflichtet, die Entdecker mittels Zitaten anzuerkennen. Auf diese Weise werden Entdecker durch die Anerkennung ihrer Fachgenossen dafür belohnt, dass sie ihre Kenntnisse der Öffentlichkeit zugänglich gemacht haben...“

Zitationen sind wichtig bei der Interpretation der Neuartigkeit und Bedeutung einer Veröffentlichung und sie müssen deshalb sorgfältig vorbereitet werden. Forscher sind für eine gründliche Literatursuche verantwortlich, sie müssen vorangegangene Arbeiten genau zitieren. Diese Verantwortung schließt ein, dass Autoren sich bemühen sollten, die Originalliteratur zu zitieren (und zu lesen!) statt einer Veröffentlichung jüngerer Datums oder eines Übersichtsartikels, die auf dem früheren Artikel beruhen.“<sup>[87]</sup>

Im Jahre 2010 schrieb D.M.P. zusammen mit Blatov und O'Keeffe eine Arbeit über eine Nomenklatur von Netzen.<sup>[79]</sup> Diese Arbeit ist mehr als 300-mal zitiert worden, aber leider ziemlich häufig unter Benutzung der falschen Nomenklatur, nämlich derjenigen, die wir den Leuten zu vergessen lehren wollten. Die Arbeit wurde zitiert, aber offenkundig nicht gelesen. Simkin und Roychowdhury stellten ein stochastisches Modell vor, mit dessen Hilfe der prozentuale Anteil von Publikationen abgeschätzt werden kann, die tatsächlich von den Autoren gelesen wurden; das Resultat war eine entmutigend kleine Zahl.<sup>[88]</sup>

Auf der zweiten „World Conference on Research Integrity“ in Singapur vom 22.–24. Juli 2010 wurde ein Positions-papier über „Responsible research publication: international standards for authors“ entwickelt. Es enthält einige Punkte (zu wenige in unseren Augen) über das Zitieren; unter anderem heißt es da:

„2.6 Autoren sollen die Arbeiten anderer in Form von Zitaten und Belegen genau darstellen.“

4.3 Relevante frühere Arbeiten und Publikationen, gleichgültig ob von anderen Forschern oder von sich selber, sollen ordentlich belegt und zitiert werden. Die Primärliteratur soll, wenn immer möglich, zitiert werden.

4.4 Daten, Texte, Abbildungen oder Ideen, die auf andere Forscher zurückgehen, sollen ordentlich anerkannt werden und nicht so präsentiert werden als stammten sie vom Autor selbst. Originalzitate, die den Veröffentlichungen anderer Forscher direkt entnommen wurden, sollen in Anführungszeichen erscheinen unter Angabe des korrekten Zitats.“<sup>[89]</sup>

Im Laufe der Zeit, so denken wir, sah man immer weniger Anleitungen für den sich entwickelnden wissenschaftlichen Autor, der eigene Lehrer und die wissenschaftliche Literatur genügten. In den Jahren zwischen 1963 und 1979 nahm das Interesse an und das Schreiben über die Zitationspraxis zu, wobei deren Beginn mit den Pionierarbeiten von Eugene Garfield über Zitationsindices am Anfang dieser Periode lag. Der entscheidende Punkt war hier, dass das Erstellen von Zitationsindices nur dann wertvoll war, wenn es nicht auch die Zitationspraxis war. Wie Gene schrieb:

„Es ist offenkundig, dass Zitationsindices nur in dem Maße wirksam sein können, wie die Bibliographien in publizierten Veröffentlichungen akkurate Spiegelungen der früheren Literatur sind.“<sup>[90]</sup>

In seiner bemerkenswerten *Current Contents* Kolumne, an die sich die Älteren unter uns gern erinnern, schrieb Garfield bei zahllosen Gelegenheiten in seinem wunderbaren, prägnanten Stil über das Indizieren von Zitaten. Die brüchigen Einzelhefte dieser kleinen Zeitschrift sind weitgehend verschwunden. Aber glücklicherweise wurden Genes Essays gesammelt.<sup>[91]</sup> In einem dieser Aufsätze formulierte Garfield auch eine kurzgefasste Liste über die Gründe, weshalb man zitiert:<sup>[92]</sup>

1. Um den Pionieren Ehrerbietung zu erweisen
2. Um verwandte Arbeiten anzuerkennen (Ehrerbietung gegenüber Fachkollegen)
3. Um die Methodik, die Ausrüstung etc. bekannt zu machen
4. Um Hintergrundliteratur zur Verfügung zu stellen
5. Um seine eigenen Arbeiten zu korrigieren
6. Um die Arbeiten anderer zu korrigieren

7. Um vorangegangene Arbeiten zu kritisieren
8. Um Ansprüche zu belegen
9. Um auf zukünftige Arbeiten aufmerksam zu machen
10. Um Hinweise auf wenig verbreitete, wenig indizierte oder (noch) nicht zitierte Arbeiten zu geben
11. Um Daten und Fakten (wie physikalische Konstanten etc.) zu belegen
12. Um Originalpublikationen, in denen eine Idee oder ein Konzept (erstmalig) diskutiert wurde, zu identifizieren
13. Um Originalpublikationen oder andere Arbeiten vorzustellen, die nach einem Namensgeber benannt werden, wie etwa die Hodgkinsche Krankheit, Pertos Gesetz oder die Friedel-Crafts-Reaktionen
14. Um Ansprüche oder Ideen anderer abzuwehren („negative claims“)
15. Um Prioritätsansprüche anderer abzuwehren („negative Ehrerbietung“).

Wie man sieht, besteht eine beträchtliche Überlappung mit unserer Liste. Wir danken Gene viel – und deshalb haben wir unsere vorliegende Arbeit ihm auch gewidmet.

Wohl wahr, die Pest der „Impaktfaktoren“ und die zweifelhafte Anwendung „scientometrischer“ Kriterien zur Bestimmung des Wertes von Individuen sind aus seiner Erfahrung hervorgegangen. Aber der Missbrauch wertvoller Erfindungen ist leider allzu menschlich. Eugene Garfield ist etwas besonderes. So schreibt zum Beispiel Harriet Zuckerman: „Gene ist auf höchst unterschiedliche Art und Weise außergewöhnlich. Außergewöhnlich nicht nur für die Schaffung von Zitationsindices für die (exakten) Wissenschaften, sondern auch für die Sozial- und die Geisteswissenschaften. Außerdem hat er dafür gesorgt, dass der Akt des Zitierens in einem sehr großen intellektuellen Zusammenhang platziert wurde.“<sup>[24]</sup> Und Leah Rea McEwen sagt einfühlsam: „...er ist über seine Techniken und die zugrundeliegenden Prämissen immer sehr offen gewesen, sehr freimütig. Sie beruhen auf wissenschaftlichen Kernpraktiken wie der Zitation, die es dem individuellen Gelehrten gestattet, kenntnisreich an dieser Praxis zu partizipieren.“<sup>[93]</sup>

Roald Hoffmann hat eine im Jahre 2004 erschienene Dissertation von Jeppe Nicolaisen,<sup>[94]</sup> die z.T. veröffentlicht worden ist,<sup>[95]</sup> als besonders lehrreich empfunden. Im 2. Kapitel seiner Arbeit, das sich mit „Zitationstheorien“ befasst, argumentiert Nicolaisen, dass die Einstellungen gegenüber Zitaten stark von miteinander streitenden philosophischen/soziologischen Weltbildern über die Wissenschaft beeinflusst werden. Die eine Gruppe, mit einem realistischen/normativen Blickwinkel, betrachtet Zitationen als einen Weg, wahrheitsgetreu über unseren Kenntnisstand über die Welt – gewonnen durch Experiment und Theorie – zu berichten. Die andere Gruppe, die man grob gesprochen als „soziale Konstruktivisten“ bezeichnen könnte, sieht wissenschaftliche Erkenntnis als sozial konstruiert an; Zitationen werden damit zu einem Werkzeug dieses Konstruierens. R.H., immer ein Anhänger des Mittelwegs,<sup>[96]</sup> hält beide Sichtweisen für wertvoll und findet Nicolaisens Rückführung auf mögliche Einwände gegen Mertons Ansichten besonders interessant.

Der Artikel von Nicolaisen enthält auch eine reichhaltige Liste von Referenzen zur Zitationsdiskussion. Wir erwähnen

hier nur eine kleine Auswahl, die eine leichte Bevorzugung neuerer Arbeiten aufweist, in denen spezifische Fälle aus der Chemie diskutiert werden.<sup>[97–103]</sup> Die Beschränkung der Zitate, die sich auf eine weit umfangreichere Literatur beziehen, führt uns schmerzlich vor Augen, dass wir damit dieselbe existentielle Entscheidung treffen müssen, der sich jeder Autor eines akademischen oder wissenschaftlichen Beitrags stellen muss.

Als überaus wertvoll erweist sich ein Beitrag von Lutz Bornmann und Hans-Dieter Daniel, auf den wir durch einen Gutachter aufmerksam gemacht wurden. Diese Autoren legen die größte Sammlung von Studien zum Zitationsverhalten vor, die uns bekannt ist, und leisten praktisch eine Mettaanalyse der Literatur dieses Gebiets.<sup>[104]</sup>

Als führender Wissenschaftssoziologe des Zeitalters hatte Merton ein besonderes Interesse an Zitation als Währung der Reputation. Wie wir schon angemerkt haben, schrieb er über das Stehen auf den Schultern von Riesen. Auch formulierte er den Matthäus-Effekt<sup>[105]</sup> und schlug die Idee der „Auslösung durch Einverleibung“ vor (er nannte sie „anatopisches oder palimpsestisches Syndrom“ in *On the Shoulders of Giants*).<sup>[1,106]</sup> Wir werden unseren Essay mit einem Merton-Zitat beenden.

## Moderne Zeiten

Die Fälle, die wir geschildert haben (und ein weiterer, der noch kommt), sind Beispiele für das offene Scheitern der Zitationspraxis: die Auslassung eines Zitats zu einer vorangegangenen Arbeit, weil diese dem Autor unbekannt war. Sprechen wir ihn dafür wegen Mangels an Beweisen frei.

In diesen Fällen ist das Versäumnis zu zitieren essentiell für die Ansprüche, die mit der Publikation erhoben werden. Die nicht zitierte Arbeit bildete klar einen Präzedenzfall. Und wenngleich durch die Arbeiten, die wir erwähnen, ein „Mehrwert“ geschaffen wurde, ist offenkundig, dass sie auf andere Weise geschrieben worden wären, hätten ihre Autoren die früheren Arbeiten gekannt. Wäre der Wert der Arbeit verringert worden? Vielleicht – obwohl die Menschen über eine unbegrenzte Phantasie verfügen, wenn es darum geht, den Wert ihres eigenen Beitrags zu vergrößern. Das Versagen in diesen Fällen war sozusagen unschuldig. Und es war auch unnötig; es hätte vermieden werden können.

Die Informationstechnologie und der Computer haben den Zugang zur Literatur demokratisiert. Obwohl es kostspielig ist, SciFinder zu abonnieren, sagt uns unser anekdotisches Gefühl, dass die Literatur – und in ihr digital zu suchen – heute leichter zugänglich ist als früher. Und nicht lediglich in den reichen Ländern. Wissenschaftler mit einer Biegen- oder Brechen-Einstellung finden heute in der ganzen Welt ihre Wege zu Journals oder zu Suchwerkzeugen.

Google, Bing, Yahoo, Google Scholar und andere Suchmaschinen sind unglaublich leistungsfähig beim Ausgraben von Informationen aus der wissenschaftlichen Literatur, auch wenn ihre Webseiten sichtbar mit Reklamemüll verschmutzt sind. SciFinder, Scopus und Web of Science stehen den meisten Chemikern zur Verfügung. Man muss das Suchen aber lernen. Die Handwerkskunst des wissenschaftlichen Su-

chens ist weitgehend intuitiv, nur teilweise richtig erlernt. Die Ratschläge, die wir weiter unten geben, sind so offenkundig, dass sie fast albern sind. Dennoch: das Offenkundige wird oft nicht getan, wieder und wieder nicht.

Manches Suchen bleibt genauso schwierig wie es in den Zeiten einer physisch vorhandenen Bibliothek war, mit den endlosen Regalen und einschüchternden Bänden von *Chemical Abstracts* und dem *Zentralblatt*. Herauszufinden, ob bereits früher Berechnungen des CCCF-Moleküls durchgeführt wurden, ist vergleichsweise einfach; nach den Produkten zu suchen, die durch seine Dimerisierung oder durch Polymerisation entstehen können, ist schon schwieriger. Einer von uns (R.H.) war erstaunt darüber, dass er im SciFinder nach einer Struktur mit stereochemischen Details suchen konnte, z.B. die einer *trans*-Verknüpfung eines Cyclobutan-rings mit einem Cyclohexadien. Und war davon amüsiert, dass einige der „Treffer“ keine wirklichen Treffer waren, weil irgendjemand eine Entscheidung fällen musste – eine falsche, wie sich zeigte – über die Stereochemie der Ringverknüpfung aus einer abstrahierten Publikation, aus der gerade jene nicht hervorging.<sup>[107]</sup>

Irgendwie denkt man, sollte es heute leichter sein, nach Präzedenzfällen zu suchen. Und wir denken auch, dass das bei der Suche nach einem neuen, computerbasierten Suchwerkzeug für unser spezifisches Problem der Kohlenstoffallotropie so ist. Wie kann es dann aber sein, dass es derartige Zitierfehler gibt? Es sieht fast so aus, als sei die intellektuelle Faulheit der Menschen im gleichen Maße gewachsen wie die Informationstechnologien, über die sie verfügen können!

Ein einfühlsamer Gutachter dieser Veröffentlichung hat Einspruch eingelegt gegen unseren bequemen Vorwurf der Faulheit. Seine Worte verdienen es, hier zitiert zu werden:

*„Sind Wissenschaftler heute inhärent fauler als in früheren Zeiten oder gibt es andere Faktoren? Vielleicht müssen sogar sehr viele in Betracht gezogen werden, sofern sich die Prämisse des fehlenden Zitierens als nachhaltig erweist? Als dazu beitragende Faktoren könnte man erwägen: i) den Trend zu interdisziplinärer Forschung in neuerer Zeit, der dazu führt, Literatur auf Gebieten zu zitieren, auf denen man nicht unbedingt ein Fachmann ist, ii) die explosionsartige Zunahme an wissenschaftlichen Publikationen, verstärkt dadurch, dass die Tatsachen eine immer entfernter liegende Bedeutung annehmen, was für die jungen (und nicht mehr ganz so jungen) Wissenschaftler zu einem ständigen Kampf führt, um an der Spitze stetig expandierender Gebiete zu bleiben während neue auf die Tagesordnung kommen, oder iii) als Folge des Informationszeitalters die exzessive Konzentration auf bibliometrische Daten, die eine Rankingkultur ermutigt, die die wissenschaftlichen Methodik zu übertrumpfen droht. In einer sich beschleunigenden Kultur, in der niemand Zeit hat und Produktivität alles ist, muss Gelehrsamkeit befürchten, auf Kosten von Zweckmäßigkeit zu leiden.“<sup>[108]</sup>*

Gut gesagt! Wir würden dennoch argumentieren, dass es einen der Computerzeit geschuldeten Anreiz zur Faulheit gibt. Wir wechselwirken mit der Informationstechnologie und sehen überaus deutlich, wie effizient Computer bei bestimmten Problemen helfen können, sei es bei der Suche auf unserem Laptop nach einem deplatzierten Satz oder beim Umordnen der Endnoten dieser Publikation. Wenn wir des-

halb den Computer anweisen, nach einem Molekül oder einem chemischen Konzept zu suchen, vergessen wir nur allzu leicht, dass da, wo man Abfall reinsteckt, auch Abfall rauskommt,<sup>[109]</sup> und in unserem psychologischen Vertrauen auf das, was ein Computer leisten kann, annehmen, dass seine Suche (mit unserer begrenzten Suchfrage) uns das Weltwissen bringen wird.

Damit diese Veröffentlichung sich nicht in eine Jeremiade verwandelt, lassen sie uns nur einen Satz zum Lob der Faulheit sagen. Im gegenwärtigen Zusammenhang hat diese menschliche Eigenschaft wenigstens eines für sich: Es hält Menschen davon ab, zu viele Zitationen zu verwenden.

### **Roalds Geschichte: Ein 3,4-verknüpftes Netz**

Jetzt also der zweite Fall von Gedächtnisschwund beim Zitieren. Wieder bitten wir den Leser um Vergebung, was die technischen Details anbelangt.

Im November 2013 blickte Roald Hoffmann auf die Artikel der Woche in seinem Old Reader RSS Aggregator und stieß dabei auf eine interessante Veröffentlichung in den *Proceedings of the National Academy of Sciences* in der Ausgabe vom 19. November 2013. Sie trug den Titel „Stable three-dimensional metallic carbon with interlocking hexagons“ und hatte S. Zhang, Q. Wang, X. Chen und P. Jena als Autoren.<sup>[110]</sup> Die erste Abbildung des Artikels sah schrecklich vertraut aus. Und in der Tat: Es war die Elementarzelle von **tfi**, die Struktur, die oben als **5** gezeigt wird. In der PNAS-Veröffentlichung hieß sie T6 und *glitter* bei Roald Hoffmann und Michael Bucknum;<sup>[35]</sup> letzterer hat weiterhin über dieses und ähnliche Netze publiziert.<sup>[111–114]</sup> Der Artikel untersuchte T6, berechnete seine elektronische Struktur, seine Phononen und seine Stabilität. In einem weniger umfangreichen Teil der Publikation wurde ein anderes, mit **5** verwandtes Gitter behandelt. Unsere Originalarbeit aus dem Jahre 1994 berechnete die elektronische Struktur dieses hypothetischen Kohlenstoffallotrops gleichfalls, das sowohl drei- als auch vierfach-verknüpfte Kohlenstoffatome enthielt,<sup>[115]</sup> die üblicherweise als  $sp^2$ - und  $sp^3$ -Kohlenstoffatome bezeichnet werden.<sup>[116]</sup> Wir verwendeten seinerzeit eine weniger hochgezüchtete Methode als sie in der Arbeit von Zhang et al. verwendet wurde, fanden aber gleichfalls einen metallischen Charakter.

Die Arbeit von Zhang, Wang, Chen und Jena zitierte unsere Publikation nicht. Die Frage nach einem Plagiat stellte sich eindeutig nicht. Das war an der Art und Weise zu erkennen, wie die Arbeit präsentiert und an der Pekinger Universität durchgeführt worden war: es war ein Original. Sie hatten lediglich unsere Studien übersehen. Und unsere Arbeit war nicht an irgendeiner obskuren Stelle publiziert worden, sondern in einem der beiden weltweit in der Chemie führenden Journale! Und obendrauf kam noch, dass unsere Arbeit in der Literatur ziemlich häufig zitiert wurde.

Es war offenkundig: Der gesamte Publikationsprozess war von unten nach oben zusammengebrochen. Weder die vier Autoren, noch der für die Publikation bei PNAS verantwortliche Editor (H.-k. Mao; PNAS arbeitet nach einem System mit namentlich bekannten Editoren, die einer be-

stimmten Publikation zugeordnet werden) sowie die Gutachter, die der Editor zur Begutachtung der Arbeit eingeladen hatte, waren in der Lage, ein frühere, im *Journal of the American Chemical Society* erschienene Arbeit zum Thema zu erkennen.

Die Angelegenheit wurde bereinigt, indem ich die Autoren auf unsere frühere Arbeit aufmerksam machte, und diese eine Korrektur veröffentlichten. Ich musste einen der Autoren gleichfalls darum bitten, eine Pressemitteilung richtigzustellen, die seine Universität über die Publikation veröffentlicht hatte.

### **Suche, Suche**

Was war in dem gerade geschilderten Fall falsch gelaufen? Die Autoren behaupteten, sorgfältig gesucht, aber unsere Arbeit eben nicht gefunden zu haben. Es ist in der Tat nicht einfach, und war es auch in der Vergangenheit nicht (es wird jedoch, wie wir unten zeigen werden, leichter) nach dreidimensionalen Netzwerken zu suchen – oder nach jedem anderen Konzept, nach jeder anderen Kategorie. Es ist aber im Informationszeitalter auch nicht so schwierig. Hier sind einige offensichtliche Ratschläge über das Suchen:

1. Man benutze mehrere Suchmaschinen.
2. Man denke sich unterschiedliche Wege aus, unterschiedliche Suchbegriffe, um zur selben Information zu gelangen.
3. Man lasse jeden Autor einer Publikation separat suchen. Möglicherweise ist es auch sinnvoll, jemandem außerhalb der eigenen Gruppe den Manuskriptentwurf zur Lektüre zu geben und dann auf der Grundlage eines nichtinformierten Lesens suchen zu lassen.
4. Wenn Sie wissen, dass es eine Forschergruppe gibt, die auf dem gleichen Gebiet arbeitet, kann es sinnvoll sein, eige-ne, jüngere Mitarbeiter sorgfältig durch die Publikationsliste des Seniormitglieds der Arbeitsgruppe gehen zu lassen; entsprechende Listen findet man leicht im Netz.
5. Wenn Sie eine wichtige frühere Arbeit auf dem entsprechenden Gebiet finden, verfolgen Sie Referenzen, die sich darauf beziehen, z.B. durch das Web of Science.
6. Man schicke einen fortgeschrittenen Manuskriptentwurf an Experten auf dem jeweiligen Gebiet und frage sie spezifisch danach, ob man irgendwelche Literaturzitate ausgelassen hat.

Ganz allgemein empfehlen wir ein vorbeugendes Training eigener Studenten und Postdoktoranden. Eine Variante hiervon besteht darin, ihnen eine andere Ihrer Arbeiten zu geben, in der die Literaturzitate entfernt worden sind – und dann zu sehen, wie viele der wichtigsten sie rekonstruieren können.

### **Wie man mit Missgeschicken umgeht**

Was ist zu tun, wenn man, trotz sorgfältiger Suche, vergessen hat, eine ausschlaggebende Publikation in einer eigenen, publizierten Arbeit zu erwähnen? So etwas passiert –

selbst den Autoren der vorliegenden, übergebührlich moralisierenden Veröffentlichung. In der Tat: R.H. schätzt, dass ihm so etwas bei rund einem Drittel seiner (viel zu) zahlreichen Publikationen passiert.

Es gibt zwei mögliche Sachlagen. 1) Dass Sie die Auslassung selber finden, nach erfolgter Veröffentlichung und 2) dass der Autor der übersehnen Arbeit Ihnen schreibt. Wir wollen zuerst den schwierigeren Fall behandeln, den zweiten.

In Ihrer Antwort auf den Brief des übersehnen Autors sollten Sie **zuallererst** keine Ausflüchte machen oder gar den Fehler beim „Kläger“ suchen. **Entschuldigen Sie sich.**

Intellektuelles Eigentum ist das, was Wissenschaftler schätzen. Und wenn dieses Eigentum – Ideen, Moleküle – von anderen nicht anerkannt wird, dann schmerzt das, wie wir und Bright Wilson und Mario Biagioli bereits sagten. Es ist schlicht verletzend. Wenn man jemand verletzt hat, ist das Erste, was man tut, ihn zu trösten oder Mitgefühl auszudrücken. Genauso als hätte man es mit dem eigenen Sohn oder der eigenen Tochter zu tun, wenn er/sie hingefallen ist, gleichgültig ob es eine von den Kindern selbst verursachte Dummheit war. Gerade Sie sollten sich zuerst entschuldigen, wenn sie den Schmerz erzeugt haben, auch wenn das unbedachtigt war.

**Zweitens, schlagen Sie einen Plan vor, wie man den Fehler zurechtrücken kann.** Sie können zum Beispiel versichern, dass Sie in Zukunft in jeder Ihrer Publikationen auf diesem Gebiet darauf achten werden, die Arbeit des Betroffenen zu zitieren. Oder anbieten, ein Corrigendum zu Ihrem Artikel in der Zeitschrift zu veröffentlichen.

Wenn Sie aber stattdessen damit beginnen, die Person, die sich beklagt, zu kritisieren – so sehr Sie das möchten und selbst wenn es verdient ist –, dann lösen Sie – und nur Sie – eine Eskalation der Gefühle in diesem Diskurs aus. Oder um es auf gut Deutsch zu sagen: Sie beginnen einen Streit. Das ist keine gute Idee. Es gibt genug Unfrieden auf der Welt – zwischen Ländern, zwischen Ehepartnern. Man sollte darauf hinarbeiten, Konflikte zu entschärfen, nicht sie zu erzeugen. Niemand wird Sie für einen schlechteren Wissenschaftler halten, wenn Sie sich entschuldigen. Und Sie selbst werden sich besser fühlen, wenn Sie das tun.

**Drittens, geben Sie nicht Ihren Studenten oder Ihren Mitarbeitern die Schuld an dem Fehler.** Wohl kann es sein, dass diese bei ihrer Literatursuche nicht gut genug gearbeitet haben. Aber, was den Studenten anbelangt, waren es nicht Sie, die dabei versagt haben, ihn für diese Tätigkeit gut genug ausgebildet zu haben? Und was die Mitarbeiter betrifft: Sie haben offenbar deren Forschung nicht genau genug kontrolliert. In den Wissenschaften vertraut jeder jedem – und man ist kritisch gegenüber jedermann, besonders gegenüber Freunden und sich selbst. Bitte werden Sie nicht wütend über Ihre Frau oder Ihren Ehemann oder die Kinder, nur weil Sie selber etwas vermasselt haben.

**Viertens, nutzen Sie die Erfahrung, um ihre Leistungen in Zukunft zu verbessern.** Denken Sie nach, obgleich die ersten Entschuldigungen, die Ihnen in den Sinn kommen oder die Kritik an der Person, deren Arbeiten Sie übersehen haben, in Wirklichkeit nur ein Beleg Ihrer Faulheit sind. Diese Kritik ist meistens der Art, dass „die Arbeit in einem obskuren (rus-

sischen, chinesischen, amerikanischen, open source) Journal erschienen ist“. Oder: „Die Idee war nicht genügend klar herausgearbeitet von den Originalautoren der Publikation“. Nutze das Fiasko, um besser zu werden!

Andere Entschuldigungen wie etwa: „Die Zeitschrift *Nature* erlaubt ja nur 30 Literaturstellen; natürlich kannte ich Ihre Arbeit, aber ich durfte sie nicht zitieren“. Oder: „Mein Mitarbeiter war federführend bei der Arbeit und er hat gerade den Literaturhinweis gestrichen“ sind allzu durchsichtige Entschuldigungen bzw. Beleg Ihrer eigenen Unzulänglichkeiten. Wenn es die Wahl gibt, ein eigenes Literaturzitat zu entfernen oder das eines anderen, streichen Sie das eigene. Sie werden sich danach besser fühlen.

Jetzt zum einfacheren Fall: wenn Sie die Auslassung selbst bemerken oder irgendjemand – außer der Autor, dem Sie Unrecht getan haben – Sie darauf hinweist. Wir schlagen vor, genauso zu verfahren wie oben – schreiben Sie den Autoren gemäß den beiden oben erwähnten Vorschlägen.

Was könnte man tun, wenn man entdeckt, dass in der Veröffentlichung B eine Arbeit A nicht zitiert wird, wobei beide nicht von Ihnen stammen? Schreiben Sie einen höflichen Brief an den Korrespondenzautor der Publikation B, in dem Sie sanft auf die Arbeiten in Veröffentlichung A hinweisen. Ich würde in diesem Brief nicht darauf hinweisen, dass der Autor von Beitrag B irgendetwas tun soll, aber es gibt auch andere Meinungen. Schicken Sie dann eine Kopie Ihres Briefs an den Autor von A. Sie werden einen Freund gewinnen.<sup>[117]</sup>

Wir haben oben zwei Fälle aus der Praxis des Zitierens im Detail vorgestellt. Wir wollen aber nicht nur klagen, wir wollen auch etwas gegen die erwähnten Missstände tun, selbst wenn wir uns dabei nur in einem eingeschränkten Untergebiet der Festkörperchemie bewegen. Im nächsten Abschnitt zeigen wir, was wir unternommen haben. Die Benutzung einer Fachsprache ist dabei unvermeidlich, und der Leser kann den ganzen Absatz auch überspringen. Aber sie oder er sollte die letzte Abbildung nicht verpassen, eine Grafik, die verständlich, was schief gehen kann.

### **Ein der Computerzeit gemäßes Werkzeug, um Autoren auf dem Gebiet der Kohlenstoffallotropen zu helfen**

Ehrlichkeit in der Zitationspraxis wird nie etwas sein, was an einen Computer delegiert werden kann. Ethik ist für Menschen. Davide M. Proserpio und seine Mitarbeiter Artjom A. Kabanov und Andrey A. Golov haben ein Werkzeug entworfen, das zukünftigen Forschern auf dem Gebiet der Kohlenstoffallotropen dabei helfen wird, Doppelarbeit zu vermeiden und ihren Weg zu einer besseren Zitationspraxis zu ebnen. Hätte dieses Werkzeug der Wissenschaftlergemeinde schon früher zur Verfügung gestanden, hätten die obigen Beispiele vermieden werden können.

Wir durchsuchten die Literatur über Kohlenstoffallotropen mit Hilfe dreier Datenbanken: Web of Science, Scopus und Scifinder, mit Querverweisen für alle Referenzen, der Extraktion von Koordinaten (soweit sie angegeben wurden) oder der Nachfrage bei den Autoren, sie zur Verfügung zu

stellen. Außerdem haben wir versucht, den Literaturzitaten Abbildungen zu entnehmen bzw. sie aus den dünnen Daten abzuschätzen, die die ältere Literatur bereithält. Wir studierten mehr als 500 Publikationen – die meisten von ihnen nach 2000 veröffentlicht –, wobei die geometrischen Daten (als kristallographische Koordinaten) für mehr als 600 Allotrope gesammelt wurden.

Mit Hilfe der Programmbibliothek ToposPro,<sup>[118]</sup> für die topologische Kristallchemieanalyse vergleichen wir die Allotrope, um Duplikate herauszufiltern (die – wie schon erwähnt – oft unterschiedliche Namen tragen). Am Ende hatten wir 280 singuläre Kohlenstoffallotrope mit 3-Periodizität erkannt. Diese gehörten zu 256 eigenständigen topologischen Typen – in anderen Worten, verschiedenen zugrundeliegenden Netzen. Ein Allotrop, das z.B. eine eingeschobene Dreifachbindung  $\text{C}\equiv\text{C}$ - enthält, die lediglich den Abstand zwischen den 3- bzw 4-koordinierten Knoten verlängert, besitzt dasselbe zugrundeliegende Netz wie das Stammsystem mit einer direkten C-C-Einfachbindung.<sup>[119]</sup> Wir bezeichnen das jeweilige Allotrop mit einem unverwechselbaren Namen, wobei derselben Strategie gefolgt wurde, wie bei der Analyse der Koordinationsnetzwerke: Zuerst nutzten wir – falls verfügbar – einen Dreibuchstabennamen in RCSR,<sup>[37]</sup> und danach andere Namen, die bereits für Koordinationsnetzwerke genutzt worden sind. Für die verbleibenden 125 schlagen wir einen kompakten Namen vor, der aus seiner Liste der nicht-äquivalenten 3- oder 4-fach koordinierten Knoten besteht, aus dem Buchstaben „T“ für 3-Periodizität und einer Ordnungszahl. Beispielsweise heißen die sechs Allotrope, die von einem von uns (D.M.P.) beschrieben wurden und aus Zeolithnetzen ohne Drei- oder Vierringe<sup>[120]</sup> extrahiert wurden: 4^6T16, 4^6T17, 4^6T18, 4^7T12, 4^8T15, 4^8T16. Die Namen zeigen, dass die Allotrope 6, 7 oder 8 individuelle 4-c-Knoten aufweisen. Die maximale Raumgruppensymmetrie der Netze wurde unter Zuhilfenahme von *Systre*<sup>[121]</sup> aus dem *Gavrog*-Programmpaket ermittelt.<sup>[122]</sup>

Alle Daten wurden gesammelt und als Webtabelle in der Samara Carbon Allotrope Database (SACADA) organisiert (<http://sacada.sctms.ru>). Bei praktisch allen Kohlenstoffallotropen handelt es sich natürlich um hypothetische Strukturen, prognostiziert auf der Basis mathematischer (topologischer) Argumente oder quantenmechanischer Rechnungen, größtenteils vom DFT-Typ. Unterschiedliche DFT-Pakete wurden verwendet, um die Allotrope zu modellieren und unterschiedliche Eigenschaften zu berechnen, wodurch gelegentlich Resultate erzielt wurden, die nicht leicht miteinander verglichen werden können.

Um den Forschern auf diesem Gebiet zu helfen, entschlossen wir uns, alle gesammelten Allotrope erneut zu berechnen. Dabei wurde derselbe Approximationsgrad verwendet und die relative Energie per Atom im Vergleich zu Diamant ermittelt. Alle Berechnungen wurden mit dem VASP-Programmpaket<sup>[123]</sup> mit einem Energie-Cutoff von 400 eV und dem GGA-PBE-Pseudopotential durchgeführt; die Toleranz für die ionische Relaxation wurde bei  $10^{-6}$  eV gesetzt und vollständige Relaxation erlaubt. Das relevante  $k$ -mesh wurde automatisch generiert, wie in VASP implementiert. Die maximale Symmetrie der optimierten Strukturen

(Output in Raumgruppe P1) wurde durch das PLATON-Programm ermittelt.<sup>[124]</sup> Einige Berechnungen der Originalarbeiten können sehr wohl besser als unsrige sein, und noch bessere sind natürlich immer möglich. Der Wert unserer Arbeiten besteht darin, dass sie einen einheitlichen Vergleich erlauben. Andere physikalische Eigenschaften wurden ebenfalls extrahiert, und die Koordinaten der Netze können für Vergleiche heruntergeladen werden. Man konsultiere die Hintergrundinformationen für eine Liste der Parameter, die SACADA berechnet und spezifiziert.

Wir haben bei der Erstellung dieser Datenbank viel gelernt und möchten einen Teil dessen mit anderen teilen. Wir beginnen mit der Demonstration der Verteilung der Koordinationszahlen in den literaturbekannten Allotropen, wie in Abbildung 1 gezeigt. In Abbildung 2 zeigen wir die Verteilung der Allotropen in Abhängigkeit von der berechneten Energie, wobei die Rechnungen so erfolgten, wie oben beschrieben.

Die meisten der vorgeschlagenen Allotrope sind vierfach koordiniert (Abbildung 1), wohingegen das relative Energiediagramm (Abbildung 2) zeigt, dass alle außer sechs über eine Energie oberhalb von 0.05 eV/C relativ zu Diamant

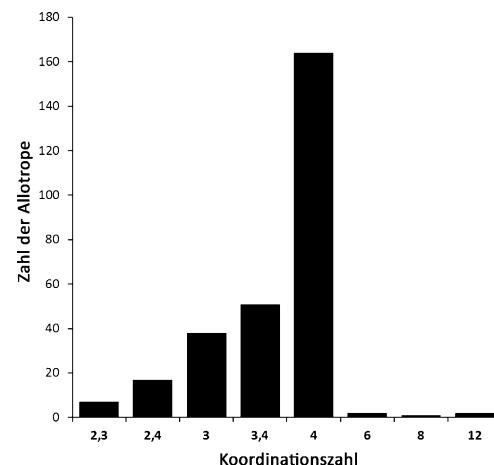


Abbildung 1. Verteilung der Allotropen bezüglich der Koordinationszahlen.

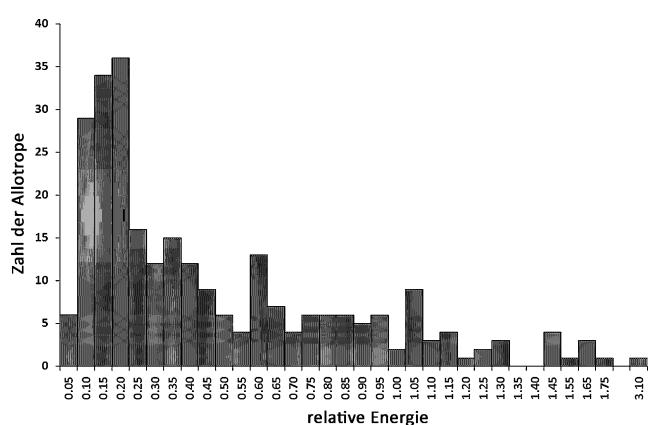
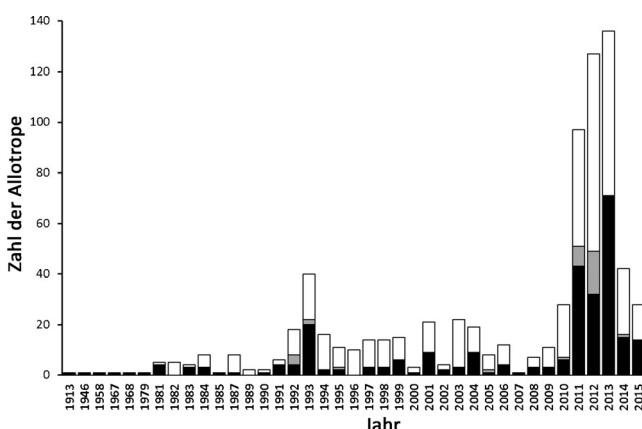


Abbildung 2. Nach der im Text beschriebenen Methode berechnete Energien; eV/C relativ zu Diamant.

verfügen. Bei all diesen sechs Strukturen handelt es sich um Polytypen oder gekreuzte Graphenschichten (die Netzwerke sind in den Abbildung S1 und S2) graphisch dargestellt. Die höchste Energie (3.10 eV) besitzt – wenig überraschend – das **nbo**-Netz, in dem alle Knoten eine quadratisch-planare Geometrie haben.

Die Verteilung der in der Literatur beschriebenen Allotrope in Abhängigkeit von der Zeit (Abbildung 3) zeigt das



**Abbildung 3.** Verteilung von neu vorgeschlagenen Kohlenstoffallotropen als Funktion der Zeit (in Schwarz) und Wiederholungen (in Weiß). Die grauen Flächen repräsentieren Wiederholungen von Strukturen, die im selben Jahr publiziert wurden. Man beachte die unterbrochene Zeitskala vor 1989.

wieder aufgeflammt Interesse an dem Thema seit 2001. Aber eben auch die hohe Wiederholungsrate. Die weißen Flächen in der Abbildung schließen neue Berechnungen älterer Strukturen ein. Die grauen Bereiche repräsentieren Strukturen, die im selben Jahr beschrieben wurden. Sie können deshalb unabhängige Entdeckungen darstellen – wir haben uns nicht näher in die relevanten Einreichungstermine vertieft.

Der Peak in der Zeitspanne von 1991 bis 1995 entstand dank der stimulierenden Wirkung, die der Vorschlag der Schwarzite im Jahre 1991 auslöste, die im Folgejahr so benannt wurden.<sup>[125–127]</sup> Unter den 32 neuen Allotropen, die in jener Fünfjahresperiode entdeckt oder berechnet wurden, gibt es 14 verschiedene Schwarzite, über die 57-mal berichtet wurde, bei einer Gesamtzahl von 91 im selben Zeitraum.

Die meisten Arbeiten behaupten die Neuartigkeit der jeweils untersuchten Struktur – und zwar mittels der zahlreichen Wege, die die Menschen ersonnen haben, um ihre Arbeit von derjenigen anderer unterscheiden zu können. Gelegentlich ist nicht leicht zu erkennen, ob diese Behauptungen tatsächlich stimmen. Auf jeden Fall gibt es herzlich wenige Anzeichen in dieser entmutigenden Grafik dafür, dass die Theoretiker auf diesem Gebiet größeren und leichteren Zugang zu wissenschaftlichen Datenbanken nutzen konnten.

In den Hintergrundinformationen stellen wir eine suchbare Tabellenkalkulationsdatei (.xls) mit allen Eintragungen der Datenbank zur Verfügung (vollständige Literaturhinweise auf 224 Publikationen und alle berichteten Werte).

SACADA ist ein offenes, lebendes Projekt. Wir laden Wissenschaftskollegen dazu ein, es zu verbessern – indem sie uns neue Strukturen/Publikationen von sich schicken, die wir übersehen haben könnten. Oder es nutzen, wenn sie dabei sind, neue Strukturen vorzuschlagen. Es ist möglich, dem Webmaster von SACADA zu schreiben und neue Vorschläge mit den Netzen abzugleichen, die in der Datenbank gesammelt sind. Wir beabsichtigen, 2D-Allotrope einzuschließen, da bereits viele Ansprüche auf „graphenartige“ Allotrope in der Literatur erschienen sind.<sup>[128–130]</sup>

Dennoch ist SACADA, so schön es ist (natürlich sind wir voreingenommen...), ein Werkzeug mit begrenzter Reichweite. Und Kohlenstoffallotrope bilden nur ein kleines Untergebiet der Festkörperchemie und -physik. Vielleicht sind wir gegenüber den schon existierenden Suchwerkzeugen ein wenig unfair gewesen, indem wir gerade dieses Gebiet – Kohlenstoffallotrope – als Beispiel gewählt haben. SciFinder, CSD, ICSD, Web of Science geben uns alle wunderbare Wege, eine Verbindung bekannter Stöchiometrie, eine Namensreaktion, die Bindungslängen einer Eu-Sn-Bindung zu finden, ja selbst eine chemische Struktur mit der jeweiligen Stereochemie. Aber, wie wir schon oben gesagt haben, ist es wesentlich schwieriger, nach einer Idee oder einem Konzept zu suchen – dem anomeren Effekt, für Radikale typische Reaktionen, faserartige Fasern mit weniger als 10 nm Dicke. Das hat in den Tagen der *Chemical Abstracts* oder des *Zentralblattes* genauso gestimmt wie heute.

SACADA ist ein Beispiel für eine kleine Datenbank, spezifisch für ein spezialisiertes Untergebiet einer Wissenschaft. Es wäre leicht, derartige netzbasierte Programme für andere Untergebiete zu entwickeln, und vielleicht, wenn nämlich ein Untergebiet eine gewisse, kritische Größe erreicht und wenn deutlich wird, dass Wissenschaftler ihre Kollegen nicht so zitieren wie sie es müssten, könnten derartige Programme sich quasi „organisch“ bilden. Dennoch hat ein Gutachter unserer Arbeit gefragt: „...ob in einem multidisziplinären Gebiet eine fokussierte Zusammenstellung wie SACADA angemessen oder überhaupt möglich wäre? Würde der Übergang zu kleineren, spezialisierten Suchdatenbanken zu besseren Resultaten führen oder würde dadurch eine größere Unsicherheit bei der Suche erzeugt? Es müssen nämlich nicht nur die Suchkriterien effektiv sein, auch das Suchmedium selbst muss geeignet sein.“<sup>[131]</sup> Das sind gute Fragen für die Zukunft.

Wir haben großes Vertrauen in den menschlichen Einfallsreichtum; es gibt Netzwerke, die darauf warten, gefunden zu werden. Aber wenn Sie nicht überprüfen, ob ein Kohlenstoffnetzwerk bereits in der Literatur beschrieben worden ist, können Sie sicher sein, dass es fleißige Herausgeber und Gutachter gibt, die das tun werden. Helfen Sie dabei, dass die weißen Flächen von Abbildung 3 verschwinden.

### Wir müssen zitieren – maßvoll und mit Gefühl

Wissenschaft zu betreiben, ohne zu zitieren, ist nicht vorstellbar. Es ist schwierig, fair und maßvoll zu zitieren. Aber es ist sehr wertvoll, die Zitate in die Veröffentlichung einzufügen, oft zu einem späten Zeitpunkt einer For-

schungsarbeit, oft erst während des eigentlichen Schreibakts. Das kann sogar die erste Gelegenheit sein (und wir sprechen hier auch über uns selbst), dass eine zitierte Publikation sorgfältig gelesen wird, in ihrer ganzen Länge. Das ist gut, wir lesen! Wenn wir überlegen, welche Literaturzitate wir berücksichtigen, welche wir auslassen sollen, wiegen wir Fragen des Vertrauens und Misstrauens ab, von Priorität und Einfluss, Geschichte und Politik, Autorität und ihre Ablehnung. Das tun wir meistens ohne großes Nachdenken, weit entfernt von der Komplexität durchdachten Lebens. Und das ist auch in Ordnung. Denn wenn wir das wiederholt tun – eine Publikation schreiben, uns entscheiden, was wir zitieren wollen – haben wir, nolens volens, den Bereich der Ethik erreicht.<sup>[132]</sup> Und dort müssen wir auch ankommen.

Wir schließen mit einem weiteren Zitat von Robert K. Merton:

*„Der anomale Charakter des geistigen Eigentums in den Wissenschaften, der erst dann vollständig sichtbar wird, wenn dieses offen verschenkt, d.h. publiziert wird, steht sowohl in Wechselwirkung mit der Moral als auch mit den kognitiven Forderungen an Wissenschaftler, die zugeben müssen, dass sie davon Gebrauch gemacht haben. Zitationen und Literaturhinweise werden deshalb in einem kognitiven und moralischen Rahmen wirksam. Was den Erkenntnisaspekt anbelangt, sorgen Referenzen für die Verknüpfung zur historischen Wissenskette und sie führen den Leser neuer Arbeiten zu Quellen, die sie überprüfen oder von denen sie selber zählen wollen. Was den moralischen Aspekt anbelangt, dienen sie zur Rückzahlung intellektueller Schulden, in der einzigen Form, in der dieses möglich ist: durch ihre offene Anerkennung.“<sup>[133–135]</sup>*

## Danksagung

R.H. dankt Jeff Seeman, Leah Rae McEwen und Harriet Zuckerman für Kommentare, Boris Michev für Hilfe mit bulgarischen Schriften und Lanxing Zhang für Studien zur Zitationshistorie in China. Beiden Autoren waren die scharfsinnigen Kommentare von Mario Biagioli und mehreren Gutachtern von Nutzen. D.M.P. dankt Giovanni Zanzotto für eine Diskussion. R.H. dankt der National Science Foundation für die langjährige Unterstützung seiner Forschungen. D.M.P., A.A.K. und A.A.G. danken der Regierung Russlands (Grant 14.B25.31.0005) und der Russian Foundation for Basic Research (Grant RFBR 14-03-97034) für Unterstützung. Wir danken Prof. Henning Hopf für die sorgfältige deutsche Übersetzung.

**Zitierweise:** *Angew. Chem. Int. Ed.* **2016**, *55*, 10962–10976  
*Angew. Chem.* **2016**, *128*, 11122–11139

- [1] R. K. Merton, *On the Shoulders of Giants: A Shandeian Postscript*, Harcourt, Brace & World, New York, **1965**.
- [2] „The structural chemistry of crystalline carbon: geometry, stability, and electronic spectrum“: I. V. Stankevich, M. V. Nikerov, D. A. Bochvar, *Russ. Chem. Rev.* **1984**, *53*, 640–655.
- [3] „Broad Family of Carbon Nanoallotropes: Classification, Chemistry, and Applications of Fullerenes, Carbon Dots, Nanotubes, Graphene, Nanodiamonds, and Combined Super-

structures“: V. Georgakilas, J. A. Perman, J. Tucek, R. Zboril, *Chem. Rev.* **2015**, *115*, 4744–4822.

- [4] Siehe die Illustration und Diskussion in: R. Hoffmann, S. Leibowitz Schmidt, *Old wine, new flasks: reflections on science and Jewish tradition*, W. H. Freeman, **1997**, S. 62–67.
- [5] Konfuzius, *Analekten*, Buch II, Kap. 21: „The master said, ‘What does the Shu-ching say of filial piety? – You are filial, you discharge your brotherly duties. These qualities are displayed in government.’ This then also constitutes the exercise of government.“ Wir danken Lanxing Zhang für den Hinweis auf diese Stelle.
- [6] A. T. Grafton, *The Footnote: A Curious History*, Harvard Univ. Press, Harvard, **1997**.
- [7] NIST Chemistry WebBook: <http://webbook.nist.gov/chemistry/>.
- [8] „Relativistic Dirac-Fock expectation values for atoms with Z = 1 to Z = 120“: J. P. Desclaux, *At. Data Nucl. Data Tables* **1973**, *12*, 311–406.
- [9] Im chemischen Kontext, siehe: „Irreproducibility in the Scientific Literature: How Often Do Scientists Tell the Truth and Nothing But the Truth“: R. G. Bergman, *Perspectives Professions* **1989**, *8*, 2–3; siehe auch den faszinierenden Blog-Eintrag über Reproduzierbarkeit in der organischen Chemie: <http://www.masterorganicchemistry.com/2015/09/01/reproducibility-in-organic-chemistry/>; Geoffrey Ozin, Reproducibility in Nanochemistry, <http://www.materialsviews.com/nanochemistry-reproducibility/>; „Estimating the Reproducibility of Psychological Science Open Science Collaboration“, Open Science Collaboration, *Science* **2015**, *349*, 943, DOI: 10.1126/science.aac4716; M. B. Yaffe, *Sci. Signaling* **2015**, *8*, e55.
- [10] „First Total Synthesis of Taxol. 1. Functionalization of the B ring“: R. A. Holton, C. Somoza, H.-B. Kim, F. Liang, R. J. Biediger, P. D. Boatman, M. Shindo, C. C. Smith, S. Kim, H. Nadizadeh, Y. Suzuki, C. Tao, P. Vu, S. Tang, P. Zhang, K. K. Murthi, L. N. Gentile, J. H. Liu, *J. Am. Chem. Soc.* **1994**, *116*, 1597–1598.
- [11] „Singletons and Multiples in Scientific Discovery: a Chapter in the Sociology of Science“: R. K. Merton, *Proc. Am. Philos. Soc.* **1961**, *105*, 470–486; Nachdruck in R. K. Merton, *The Sociology of Science: Theoretical and Empirical Investigations*, University of Chicago Press, Chicago, **1973**, S. 343–370; siehe auch „Stigler’s law of eponymy“: S. M. Stigler, *Trans. N. Y. Acad. Sci.* **1980**, *39*, 147–157.
- [12] „Plagiarism, Kinship and Slavery“: M. Biagioli, *Theory Culture Soc.* **2014**, *31*, 65–91.
- [13] N. Taylor, *LASER: The inventor, the Nobel laureate, and the thirty-year patent war*, Simon & Schuster, New York, **2000**; „Bright Idea; The First Lasers“: <https://www.aip.org/history/exhibits/laser/sections/who invented.html>.
- [14] C. Djerassi, R. Hoffmann, *Oxygen*, Wiley-VCH, Weinheim, **2001**.
- [15] H. Bloom, *The Anxiety of Influence: A Theory of Poetry*, Oxford, New York, **1973**.
- [16] Mario Biagioli (persönliche Mitteilung an Davide Proserpio, 24.1.2016).
- [17] „The Cope Award Lecture“: R. B. Woodward, *Robert Burns Woodward: Architect and Artist in the World of Molecules* (Hrsg.: O. T. Benfey, P. J. T. Morris), Chemical Heritage Foundation, Philadelphia, **2001**, S. 418–439.
- [18] „Building Bridges between Inorganic and Organic Chemistry“: R. Hoffmann in „Les Prix Nobel, 1981“, Almqvist and Wiksell, Stockholm, **1982**. Nachdruck in: *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **1982**, *21*, 711–724; *Angew. Chem.* **1982**, *94*, 725–738.
- [19] <http://pubs.acs.org/page/policy/ethics/index.html>.
- [20] <http://www.euchems.eu/publications.html>.

- [21] „CSE’s White Paper on Promoting Integrity in Scientific Journal Publications“: Scott-Lichter D and the Editorial Policy Committee, Council of Science Editors, **2012** Update. 3rd Revised Edition. Wheat Ridge, CO. <http://www.councilscienceeditors.org/resource-library/editorial-policies/white-paper-on-publication-ethics/>.
- [22] <http://arxiv.org/help/general> <https://en.wikipedia.org/wiki/ArXiv>.
- [23] Ein grundlegende Veröffentlichung zu diesem Thema ist: „Deviant Behavior and Social Control in Science“: H. Zuckerman in *Deviance and Social Change* (Hrsg.: E. Sagarin), Sage, Beverly Hills, **1977**, S. 87–138.
- [24] Harriet Zuckerman, E-Mail an Roald Hoffmann, 13.3.2016.
- [25] „The structure of diamond“: W. H. Bragg, W. L. Bragg, *Nature* **1913**, *91*, 557; W. H. Bragg, W. L. Bragg, *Proc. R. Soc. London Ser. A* **1913**, *89*, 277–291.
- [26] „A new method of X-ray crystal analysis“: A. W. Hull, *Phys. Rev.* **1917**, *10*, 661–696.
- [27] „Lonsdaleite is faulted and twinned cubic diamond and does not exist as a discrete material“: P. Németh, L. A. J. Garvie, T. Aoki, N. Dubrovinskaia, L. Dubrovinsky, P. R. Buseck, *Nat. Commun.* **2014**, *5*, 5447.
- [28] „Amorphous carbon“: J. Gibson, M. Holohan, H. L. Riley, *J. Chem. Soc.* **1946**, 456–461; „Chemical and crystallographic factors in carbon combustion“: H. L. Riley, *J. Chim. Phys.* **1950**, *46*, 565–572.
- [29] „Polybenzene, a predicted new low energy form of carbon“: G. B. Adams, M. O’Keeffe, O. F. Sankey, J. B. Page, *Mater. Res. Soc. Symp. Proc.* **1992**, *270*, 103–108; „Predicted new low energy form of carbon“: G. B. Adams, M. O’Keeffe, O. F. Sankey, *Phys. Rev. Lett.* **1992**, *68*, 2325–2328.
- [30] „Superaromaticity“: E. Osawa, *Kagaku* **1970**, *25*, 854–863 (in Japanese); E. Osawa, *Chem. Abstr.* **1971**, *74*, 698v; Z. Yoshida, E. Osawa, *Aromaticity*, Kagakudojin, Kyoto, **1971**, S. 174–178 (in Japanese); „Carbododecahedron, s-icosahedron, and carbo-s-icosahedron hypothetical systems“: D. A. Bochvar, E. G. Gal’pern, *Dokl. Akad. Nauk SSSR* **1973**, *209*, 610–612; D. A. Bochvar, E. G. Gal’pern, *Proc. Acad. Sci. USSR* **1973**, *209*, 239–241; „Spectral analysis of graphs by cyclic automorphism subgroups“: R. A. Davidson, *Theor. Chim. Acta* **1981**, *58*, 193–231; „Goal! An Exercise in IUPAC Nomenclature“: J. Castells, F. J. Serratosa, *J. Chem. Educ.* **1983**, *60*, 941; „ $C_{120}$  and  $C_{60}$ : Archimedean solids constructed from  $sp^2$  hybridized carbon atoms“: A. D. J. Haymet, *Chem. Phys. Lett.* **1985**, *122*, 421–424. siehe auch  $C_{60}$ —Buckminsterfullerene. Some inside stories (Hrsg.: H. W. Kroto), CRC, Boca Raton, **2016**.
- [31] „ $C_{60}$  – Buckminsterfullerene“: H. W. Kroto, J. R. Heath, S. C. O’Brian, R. F. Curl, R. E. Smalley, *Nature* **1985**, *318*, 162–163.
- [32] „Solid  $C_{60}$ : a new form of carbon“: W. Krätschmer, L. D. Lamb, K. Fostiropoulos, D. R. Huffman, *Nature* **1990**, *347*, 354–358.
- [33] „A Hypothetical Metallic Allotrope of Carbon“: R. Hoffmann, T. Hughbanks, M. Kertesz, P. H. Bird, *J. Am. Chem. Soc.* **1983**, *105*, 4831–4832.
- [34] „O Novych Kristallicheskich Modifikatsiach Ugleroda I Nitrida Bora (New crystalline modifications of carbon and boron nitride)“: M. V. Nikerov, D. A. Bochvar, I. V. Stankevich, *Izv. Akad. Nauk SSSR Ser. Khim.* **1981**, 1177–1178 (in Russisch); M. V. Nikerov, D. A. Bochvar, I. V. Stankevich, *Zh. Strukt. Khim.* **1982**, *23*, 177–179; „Allotropic modification of carbon“: M. V. Nikerov, D. A. Bochvar, I. V. Stankevich, *J. Struct. Chem.* **1982**, *23*, 150–152; „MO LCAO study of the electronic structure of crystal modifications of carbon. I. Electron spectra of the  $C_{1}(4_1)$  crystal modification of carbon“: M. V. Nikerov, D. A. Bochvar, I. V. Stankevich, *Zh. Strukt. Khim.* **1982**, *23*, 13–19; M. V. Nikerov, D. A. Bochvar, I. V. Stankevich, *J. Struct. Chem.* **1983**, *23*, 498–503; „MO LCAO study of the electronic structure of crystal modifications of carbon. II. Electronic spectrum of crystalline modification of carbon  $C_2(4)$ “: M. V. Nikerov, D. A. Bochvar, I. V. Stankevich, *Zh. Strukt. Khim.* **1982**, *23*, 16–20; M. V. Nikerov, D. A. Bochvar, I. V. Stankevich, *J. Struct. Chem.* **1982**, *23*, 661–665. Siehe auch die frühere Arbeit: „A dense new version of crystalline carbon  $C_8$ “: N. N. Matyushenko, V. E. Strelntsky, V. A. Gusev, *Pis'ma Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **1979**, *30*, 218–221; N. N. Matyushenko, V. E. Strelntsky, V. A. Gusev, *JETP Lett.* **1979**, *30*, 199–202.
- [35] „A Hypothetical Dense 3,4-Connected Carbon Net and Related  $B_2C$  and  $CN_2$  Nets Built from 1,4-Cyclohexadienoid Units“: M. J. Bucknum, R. Hoffmann, *J. Am. Chem. Soc.* **1994**, *116*, 11456–11464; „3,4-Connected Carbon Nets: Through-Space and Through Bond Interactions in the Solid State“: K. M. Merz, Jr., R. Hoffmann, A. T. Balaban, *J. Am. Chem. Soc.* **1987**, *109*, 6742–6751.
- [36] Jeff Seeman brachte mir in Erinnerung, dass meine Notizbücher von 1964 und 1965 voller Überlegungen und Berechnungen über  $C_n$ -Spezies, lineare Ketten und Ringe waren. Ein Teil dieser Arbeiten wurde veröffentlicht: „Extended Hückel Theory. V. Cumulenes, Polyenes, Polyacetylenes and  $C_n$ “: R. Hoffmann, *Tetrahedron* **1966**, *22*, 521–538.
- [37] „The Reticular Chemistry Structure Resource (RCSR) Database of, and Symbols for, Crystal Nets“: M. O’Keeffe, M. A. Peskov, S. J. Ramsden, O. M. Yaghi, *Acc. Chem. Res.* **2008**, *41*, 1782–1789. Siehe <http://rcsr.net>.
- [38] „The Seven Sins in Academic Behavior in the Natural Sciences“: W. F. van Gunsteren, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2013**, *52*, 118–122; *Angew. Chem.* **2013**, *125*, 128–132; „On Hype, Malpractice, and Scientific Misconduct in Organic Synthesis“: R. Carlson, T. Hudlicky, *Helv. Chim. Acta* **2012**, *95*, 2052–2062.
- [39] „Carbon Kagome Lattice and Orbital-Frustration-Induced Metal-Insulator Transition for Optoelectronics“: Y. Chen, Y. Y. Sun, H. Wang, D. West, Y. Xie, J. Zhong, V. Meunier, M. L. Cohen, S. B. Zhang, *Phys. Rev. Lett.* **2014**, *113*, 085501.
- [40] „Small rings and amorphous tetrahedral carbon“: P. A. Schultz, K. Leung, E. B. Stechel, *Phys. Rev. B* **1999**, *59*, 733–741.
- [41] „ $Li_xH_{12-x,y+z}[P_{12}O_yN_{24-y}]Cl_z$  – An oxonitridophosphate with a zeolitelike framework structure composed of 3-rings“: S. Correll, O. Oeckler, N. Stock, W. Schnick, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2003**, *42*, 3549–3552; *Angew. Chem.* **2003**, *115*, 3674–3677.
- [42] „Uninodal 4-Connected Nets II: Nets With 3-Rings“: M. O’Keeffe, *Acta Crystallogr. Sect. A* **1992**, *48*, 670–673.
- [43] „Enumeration of 4-connected 3-dimensional nets and classification of frameworks silicates, III. Combination of helix, and zigzag, crankshaft and saw chains with simple 2D nets“: J. V. Smith, *Am. Mineral.* **1979**, *64*, 551–562.
- [44] A. F. Wells, *Three-Dimensional Nets and Polyhedra*, Wiley, New York, **1977**.
- [45] „Hexagonal and trigonal sphere packings. I. Invariant and univariant lattice complexes“: H. Sowa, E. Koch, W. Fischer, *Acta Crystallogr. Sect. A* **2003**, *59*, 317–326; „Hexagonal and trigonal sphere packings. II. Bivariant lattice complexes“: H. Sowa, E. Koch, *Acta Crystallogr. Sect. A* **2004**, *60*, 158–166; „Hexagonal and trigonal sphere packings. III. Trivariant lattice complexes of hexagonal space groups“: H. Sowa, E. Koch, *Acta Crystallogr. Sect. A* **2005**, *61*, 331–342; „Hexagonal and trigonal sphere packings. IV. Trivariant lattice complexes of trigonal space groups“: H. Sowa, E. Koch, *Acta Crystallogr. Sect. A* **2006**, *62*, 379–399.
- [46] „First principles study on the structure and mechanical properties of hcp-C3 carbon bulk ring“: Q. K. Li, Y. Sun, Y. Zhou, F. L. Zeng, *Acta Phys. Sin.* **2012**, *61*, 043103 (in Chinesisch).
- [47] Dieses Netzwerk leitet sich von dem 4-verknüpften binodalen Zeolith Bikait (BIK) durch Entfernen einer Bindung ab: „Topological relations between three-periodic nets. II. Binodal nets“: V. A. Blatov, D. M. Proserpio, *Acta Crystallogr. Sect. A* **2009**, *65*, 202–212.

- [48] „Tunable Assembly of  $sp^3$  Cross-Linked 3D Graphene Monoliths: A First-Principles Prediction“: X. Jiang, J. Zhao, Y. L. Li, R. Ahuja, *Adv. Funct. Mater.* **2013**, *23*, 5846–5853.
- [49] Diese Auslassung wiederholt sich in der jüngsten Arbeit der gleichen Gruppe: [„Nanostructured Carbon Allotropes with Weyl-like Loops and Points“: Y. Chen, Y. Xie, S. A. Yang, H. Pan, F. Zhang, M. L. Cohen, S. Zhang, *Nano Lett.* **2015**, *15*, 6974–6978] – auch hier ohne Angabe der Koordinaten sowie mit der Eigentümlichkeit, dass nun der Literaturverweis zu der ursprünglichen Arbeit über ZGM-12 aufgenommen wurde, jedoch ohne klare Erwähnung der Strukturen.
- [50] „Tubulanes: carbon phases based on cross-linked fullerene tubules“: R. H. Baughman, D. S. Galvao, *Chem. Phys. Lett.* **1993**, *211*, 110–118.
- [51] „A carbon phase that graphitizes at room temperature“: R. H. Baughman, A. Y. Liu, C. Cui, P. J. Schields, *Synth. Met.* **1997**, *86*, 2371–2374.
- [52] „FLAPW investigation of the stability and equation of state of rectangulated carbon“: J. V. Badding, T. J. Scheidemantel, *Solid State Commun.* **2002**, *122*, 473–477.
- [53] „Systematic prediction of crystal structures: An application to  $sp^3$ -hybridized carbon polymorphs“: R. T. Strong, C. J. Pickard, V. Milman, G. Thimm, B. Winkler, *Phys. Rev. B* **2004**, *70*, 045101.
- [54] „Carbon allotropes and strong nanotube bundles“: H. S. Domingos, *J. Phys. Condens. Matter* **2004**, *16*, 9083–9091.
- [55] „Bonding Changes in Compressed Superhard Graphite“: W. L. Mao, H. K. Mao, P. J. Eng, T. P. Trainor, M. Newville, C. C. Kao, D. L. Heinz, J. Shu, Y. Meng, R. J. Hemley, *Science* **2003**, *302*, 425–427.
- [56] „Body-Centered Tetragonal  $C_4$ : A Viable  $sp^3$  Carbon Allotrope“: K. Umemoto, R. M. Wentzcovitch, S. Saito, T. Miyake, *Phys. Rev. Lett.* **2010**, *104*, 125504.
- [57] „Ab initio study of the formation of transparent carbon under pressure“: X.-F. Zhou, G.-R. Qian, X. Dong, L. Zhang, Y. Tian, H. T. Wang, *Phys. Rev. B* **2010**, *82*, 134126.
- [58] „Theoretical hardness and ideal tensile strength of bct- $C_4$ “: Y. Xu, F. Gao, X. Hao, *Phys. Status Solidi RRL* **2010**, *4*, 200–202.
- [59] „Low-Temperature Phase Transformation from Graphite to  $sp^3$  Orthorhombic Carbon“: J.-T. Wang, C. Chen, Y. Kawazoe, *Phys. Rev. Lett.* **2011**, *106*, 075501.
- [60] „Novel Superhard Carbon: C-Centered Orthorhombic  $C_8$ “: Z. Zhao, B. Xu, X.-F. Zhou, L.-M. Wang, B. Wen, J. He, Z. Liu, H.-T. Wang, Y. Tian, *Phys. Rev. Lett.* **2011**, *107*, 215502.
- [61] „Anisotropic ideal strengths of superhard monoclinic and tetragonal carbon and their electronic origin“: R. F. Zhang, Z. J. Lin, S. Veprek, *Phys. Rev. B* **2011**, *83*, 155452.
- [62] „Evolutionary search for superhard materials: Methodology and applications to forms of carbon and  $TiO_2$ “: A. O. Lyakhov, A. R. Oganov, *Phys. Rev. B* **2011**, *84*, 092103 (hier als bct4-Kohlenstoff).
- [63] „Phase transitions in light elements under pressure“: Q. Li, Y.-M. Ma, *Prog. Chem.* **2011**, *23*, 829–841 (in Chinesisch).
- [64] „Tetragonal Allotrope of Group 14 Elements“: Z. Zhao, F. Tian, X. Dong, Q. Li, Q. Wang, H. Wang, X. Zhong, B. Xu, D. Yu, J. He, H. T. Wang, *J. Am. Chem. Soc.* **2012**, *134*, 12362–12365.
- [65] „Stability and structural, elastic, and electronic properties of 3D-( $sp^3$ ) carbon allotropes according to DFTB calculations“: a) A. N. Enyashin, V. G. Bamburov, A. L. Ivanovskii, *Dokl. Phys. Chem.* **2012**, *442*, 1–4; „Raman activity of  $sp^3$  carbon allotropes under pressure: A density functional theory study“: b) J. A. Flores-Livas, L. Lehtovaara, M. Amsler, S. Goedecker, S. Pailhes, S. Botti, A. S. Miguel, M. A. Marques, *Phys. Rev. B* **2012**, *85*, 155428.
- [66] „C4 Carbon allotropes with triple-bonds predicted by first-principles calculations“: B. G. Kim, H. Sim, J. Park, *Solid State Commun.* **2013**, *169*, 50–56.
- [67] „Search for superhard carbon: between graphite and diamond“: A. L. Ivanovskii, *J. Superhard Mater.* **2013**, *35*, 1–14; Y. Bai, X. Zhao, T. Li, Z. Lv, S. Lv, H. Han, Y. Yin, H. Wang, *Carbon* **2014**, *78*, 70–78.
- [68] Gelegentlich wurden statt der Bezeichnung bct-C4//bct-Kohlenstoff“ andere Namen verwendet, ähnlich der Bezeichnung von Kohlenstoffnanoröhren als 3D-(2,2): „Three Dimensional Carbon-Nanotube Polymers“: Z. Zhao, B. Xu, L.-M. Wang, X.-F. Zhou, J. He, Z. Liu, H.-T. Wang, Y. Tian, *ACS Nano* **2011**, *5*, 7226–7234.
- [69] „Strength, hardness, and lattice vibrations of Z-carbon and W-carbon: First-principles calculations“: Z. Li, F. Gao, Z. Xu, *Phys. Rev. B* **2012**, *85*, 144115; „Understanding the nature of ‘superhard graphite’“: S. E. Boulfelfel, A. R. Oganov, S. Leoni, *Sci. Rep.* **2012**, *2*, 471.
- [70] „Vibrational Properties of Body-Centered Tetragonal  $C_4$ “: a) Z.-L. Lü, J.-H. You, Y.-Y. Zhao, H. Wang, *Commun. Theor. Phys.* **2011**, *55*, 513–518; „First principles study of the uniaxial compressive strength of bct-C4 carbon allotrope“: b) Q. K. Li, Y. Sun, Y. Zhou, F. L. Zeng, *Acta Phys. Sin.* **2012**, *61*, 093104 (in Chinesisch); „Compressed carbon nanotubes: a family of new multifunctional carbon allotropes“: c) M. Hu, Z. Zhao, F. Tian, A. R. Oganov, Q. Wang, M. Xiong, C. Fan, B. Wen, J. He, D. Yu, H.-T. Wang, B. Xu, Y. Tian, *Sci. Rep.* **2013**, *3*, 1331.
- [71] V. A. Greshnyakov, E. A. Belenkov, V. M. Berezin, *Crystalline Structure and Properties of Carbon Diamond Like Phases*, South Ural State University, Chelyabinsk, **2012** (in Russisch).
- [72] „Structures of Diamond-like Phases“: a) V. A. Greshnyakov, E. A. Belenkov, *J. Exp. Theor. Phys.* **2011**, *113*, 86–95; „Novel carbon diamond-like phases LA5, LA7 and LA8“: b) E. A. Belenkov, M. M. Brzhezinskaya, V. A. Greshnyakov, *Diamond Relat. Mater.* **2014**, *50*, 9–14; „New structural modifications of diamond: LA9, LA10, and CA12“: c) E. A. Belenkov, V. A. Greshnyakov, *J. Exp. Theor. Phys.* **2014**, *119*, 101–106.
- [73] „On the 4-connected nets in some Silica Structures of Boisen, Gibbs and Bukowski“: M. O’Keeffe, *Phys. Chem. Miner.* **1995**, *22*, 504–506.
- [74] „Aspects of crystal structure prediction: some successes and some difficulties“: M. O’Keeffe, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2010**, *12*, 8580–8583.
- [75] „ $CrB_4$  and  $MnB_4$ : Electronic Structures of Two Unusual Systems Containing the Tetragonal Carbon Net“: J. K. Burdett, E. Canadell, *Inorg. Chem.* **1988**, *27*, 4437–4444.
- [76] „The Geometrical Basis of Crystal Chemistry. Part 2“: A. F. Wells, *Acta Crystallogr.* **1954**, *7*, 545–554.
- [77] „Existenzbedingungen homogener Kugelpackungen in Raumgruppen tetragonaler Symmetrie“: W. Fischer, *Z. Kristallogr.* **1971**, *133*, 18–42.
- [78] „Enumeration of 4-connected 3-dimensional nets and classification of framework silicates. I. Perpendicular linkage from simple hexagonal net“: J. V. Smith, *Am. Mineral.* **1977**, *62*, 703–709.
- [79] „Vertex-, face-, point-, Schläfli-, and Delaney-symbols in nets, polyhedra and tilings: recommended terminology“: V. A. Blatov, M. O’Keeffe, D. M. Proserpio, *CrystEngComm* **2010**, *12*, 44–48.
- [80] „Über dünne Kugelpackungen“: H. Heesh, F. Laves, *Z. Kristallogr.* **1933**, *85*, 443–453.
- [81] A. F. Wells, *Further Studies of Three-Dimensional Nets*, ACA Monograph No. 8, American Crystallographic Association, Pittsburgh, **1979**.
- [82] „What do we know about three periodic nets?“: O. Delgado-Friedrichs, M. D. Foster, M. O’Keeffe, D. M. Proserpio,

- M. M. J. Treacy, O. M. Yaghi, *J. Solid State Chem.* **2005**, 178, 2533–2554.
- [83] „Network topology approach to new allotropes of the group 14 elements“: L. Öhrström, M. O’Keeffe, *Z. Kristallogr.* **2013**, 228, 343–346.
- [84] „A Short History of an Elusive Yet Ubiquitous Structure in Chemistry, Materials, and Mathematics“: S. T. Hyde, M. O’Keeffe, D. M. Proserpio, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2008**, 47, 7996–8000; *Angew. Chem.* **2008**, 120, 8116–8121. Wir fanden just, dass in dieser Veröffentlichung D.M.P. und Mitarbeiter den Ursprung von **sts** auf Lit. [80] zurückgeführt haben. Anstatt dessen hätten sie auf eine andere großartige Veröffentlichung von Laves verweisen sollen: „Zur Klassifikation der Silikate“: F. Laves, *Z. Kristallogr.* **1932**, 82, 1–14. Niemand ist frei von Sünde.
- [85] J. Barzun, H. F. Graff, *The Modern Researcher*, 5. Aufl., Harcourt, Brace, Jovanovich, Fort Worth **1992**, S. 305–306.
- [86] E. B. Wilson, *An Introduction to Scientific Research*, McGraw-Hill, New York, **1952**, S. 362–363.
- [87] Committee on Science Engineering, and Public Policy; Institute of Medicine; Policy and Global Affairs; National Academy of Sciences; National Academy of Engineering, „On Being a Scientist: A Guide to Responsible Conduct in Research“: 3. Aufl. Washington, DC, 2009.
- [88] „Read before you cite!“: M. V. Simkin, V. P. Roychowdhury, *Complex Syst.* **2003**, 14, 269–274; „Copied Citations create renowned paper?“, DOI: arxiv.org/pdf/cond-mat/0305150; siehe Diskussion in <http://science.slashdot.org/story/02/12/14/0115243/scientists-dont-read-the-papers-they-cite>. Siehe auch „Paper trail reveals references go unread by citing authors“: P. Ball, *Nature* **2002**, 420, 594.
- [89] „Responsible research publication: international standards for authors. A position statement developed at the 2nd World Conference on Research Integrity, Singapore“, July 22–24, 2010, E. Wager, S. Kleinert in *Promoting Research Integrity in a Global Environment* (Hrsg.: T. Mayer, N. Steneck), Imperial College Press/ World Scientific, Singapore, **2012**, Kap. 50, S. 309–316.
- [90] „Science Citation Index – A New Dimension in Indexing“: E. Garfield, *Science* **1964**, 144, 649–654.
- [91] E. Garfield, *Essays of an Information Scientist, Vol. 1–15*. <http://www.garfield.library.upenn.edu/essays.html>.
- [92] „Can Citation Indexing Be Automated?“: E. Garfield in *Statistical Association Methods for Mechanized Documentation* (Hrsg.: M. E. Stevens, V. E. Giuliano, L. B. Heilprin), Symposium Proceedings, Washington, **1964**, National Bureau of Standards Miscellaneous publication 269, Dec. 15, **1965**, S. 189–192. Auch in: *Current Contents* #9, March 4, **1970**, sowie in: E. Garfield, *Essays of an Information scientist, Vol. 1*, S. 84–90, 1962–1973.
- [93] Leah Rae McEwen (persönliche Mitteilung an R. Hoffmann, 18.1.2016).
- [94] J. Nicolaisen, *Social behavior and scientific practice – missing pieces of the citation puzzle*. PhD Thesis, Department of Information Studies of the Royal School of Library and and Information Science Denmark. **2004**. Download: <http://research.ku.dk/search/?pure=en/publications/social-behavior-and-scientific-practice-missing-pieces-of-the-citation-puzzle%2820928197-2b49-4947-a3e1-b2fa2ad79ac4%29.html>
- [95] „Citation analysis“: J. Nicolaisen, *Annu. Rev. Inf. Sci. Technol.* **2007**, 41, 609–641.
- [96] „The Tense Middle“: R. Hoffmann in *This I Believe II* (Hrsg.: J. Allison, D. Gediman), Henry Holt, New York, **2008**, S. 112–114.
- [97] Eine wichtige frühe Veröffentlichung: „The Norms of Citation Behavior: Prologomena to the Footnote“: N. Kaplan, *Am. Doc.* **1965**, 16, 179–184.
- [98] B. Cronin, *The Citation Process*, Taylor Graham, London, **1984**.
- [99] „How well do we acknowledge intellectual debts?“: M. Koenchen, *J. Doc.* **1987**, 43, 54–64.
- [100] „The Ethics Of Citation: A Matter Of Science’s Family Values“: B. Palewitz, *The Scientist*, **1997**, <http://www.the-scientist.com/?articles.view/articleNo/18488/title/The-Ethics-Of-Citation-A-Matter-Of-Science-s-Family-Values/>.
- [101] „A tale of two citations“: M. Errami, H. Garner, *Nature* **2008**, 451, 397–399.
- [102] „Citation Violations“: R. Gallagher, *The Scientist*, **2009**, <http://www.the-scientist.com/?articles.view/articleNo/27336/title/Citation-Violations/>.
- [103] „Citation and Ethics“: J. Reedijk, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2012**, 51, 828–830; *Angew. Chem.* **2012**, 124, 852–854.
- [104] „What do citation counts measure? A review of studies on citing behaviour“: L. Bornmann, H.-D. Daniel, *J. Doc.* **2008**, 64, 45–80.
- [105] „The Matthew Effect in Science“: R. K. Merton, *Science* **1968**, 159, 56.
- [106] „The ‘Obliteration Phenomenon’ in Science... and the Advantage of Being Obliterated!“: E. Garfield, *Current Contents*, #51/52, Dec. 22, **1975**, S. 396–398; auch in: E. Garfield, *Essays of an Information scientist*, Bd. 2, S. 396–398, 1974–1976. <http://www.garfield.library.upenn.edu/essays.html>.
- [107] Leah Rae Mc Ewen (persönliche Mitteilung an R. Hoffmann, 18.1.2016) wies darauf hin, dass der Kontakt zwischen Mensch und Maschine nicht so verschieden ist von den Wechselwirkungen des Menschen mit den alten *Chemical Abstracts* oder von zwischenmenschlichen Wechselwirkungen. Was fehlt, ist das Vorhandensein eines Dialogs zwischen mir (dem Suchenden) und dem Programmierer der *Chemical Abstracts*. An dieser Schnittstelle müssen wir noch arbeiten.
- [108] Anonymer Gutachter dieses Essays.
- [109] Siehe den Eintrag bei Wikipedia zur ersten Verwendung (1963) dieses Ausdrucks („Garbage in, garbage out“) und dessen Vorwegnahme durch Charles Babbage.
- [110] „Stable three-dimensional metallic carbon with interlocking hexagons“: S. Zhang, Q. Wang, X. Chen, P. Jena, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **2013**, 110, 18809–188013; Korrektur: S. Zhang, Q. Wang, X. Chen, P. Jena, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **2014**, 111, 1222.
- [111] „Spiroconjugation in 1-, 2-, and 3-dimensions: The foundations of a spiro quantum chemistry“: M. J. Bucknum, E. A. Castro, *J. Math. Chem.* **2004**, 36, 381–408.
- [112] „A chemically intuitive proposal for the structure of n-diamond“: M. J. Bucknum, I. Stamatin, E. A. Castro, *Mol. Phys.* **2005**, 103, 2707–2715.
- [113] „On the structure of i-carbon“: M. J. Bucknum, C. J. Pickard, I. Stamatin, E. A. Castro, *J. Theor. Comput. Chem.* **2006**, 5, 175–185.
- [114] „On the n-diamond and i-carbon nanocrystalline forms“: M. J. Bucknum, E. A. Castro, *J. Math. Chem.* **2012**, 50, 1034–1038.
- [115] Der Deskriptor „verknüpft“ im Zusammenhang mit Netzwerken sollte durch das besser passende „koordiniert“ ersetzt werden. Ebenfalls sollte man statt von „dreidimensional“ von „dreiperiodisch“ sprechen, um damit die Translationssymmetrie in 3 nichtparallele Richtungen auszudrücken, siehe Lit. [82].
- [116] Einer von uns (R.H.) zieht es vor, nicht von  $sp^2$ ,  $sp^3$  zu sprechen, weil die Hybridisierung in Methan (man denke darüber nach, wie sie zu messen wäre!) nicht exakt  $sp^3$  und die von Ethylen oder Benzol nicht exakt  $sp^2$  ist. Es ist aber nichts, weswegen man die Schwerter kreuzen müsste – ich verstehe was gemeint ist, wenn jemand Deskriptoren für die Hybridisierung angibt.
- [117] Ein schönes Beispiel dafür, wie es geht: „Addendum: The Retro-Hydroformylation Reaction“: S. Kusumoto, T. Tatsuki, K. Nozaki, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2015**, 54, 12538; *Angew. Chem.* **2015**, 127, 12720.

- [118] „Applied Topological Analysis of Crystal Structures with the Program Package ToposPro“: V. A. Blatov, A. P. Shevchenko, D. M. Proserpio, *Cryst. Growth Des.* **2014**, *14*, 3576–3586.
- [119] „Underlying nets in three-periodic coordination polymers: topology, taxonomy and prediction from a computer-aided analysis of the Cambridge Structural Database“: E. V. Alexandrov, V. A. Blatov, A. V. Kochetkov, D. M. Proserpio, *CrystEngComm* **2011**, *13*, 3947–3958.
- [120] „From zeolite nets to  $sp^3$  carbon allotropes: A topology-based multiscale theoretical study“: I. A. Baburin, D. M. Proserpio, V. A. Saleev, A. V. Shipilova, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2015**, *17*, 1332–1338.
- [121] „Identification of and symmetry computation for crystal nets“: O. Delgado-Friedrichs, M. O’Keeffe, *Acta Crystallogr. Sect. A* **2003**, *59*, 351–360.
- [122] Generation, Analysis and Visualization of Reticular Ornaments using Gavrog <http://gavrog.org/>.
- [123] „Efficiency of ab-initio total energy calculations for metals and semiconductors using a plane-wave basis set“: G. Kresse, J. Furthmüller, *Comput. Mater. Sci.* **1996**, *6*, 15–50.
- [124] „Single-crystal structure validation with the program PLATON“: A. L. Spek, *J. Appl. Crystallogr.* **2003**, *36*, 7–13.
- [125] „Diamond from graphite“: A. L. Mackay, H. Terrones, *Nature* **1991**, *352*, 762.
- [126] „Energetics of negatively curved graphitic carbon“: T. Lenosky, X. Gonze, M. Teter, V. Elser, *Nature* **1992**, *355*, 333–335.
- [127] „Negative-curvature fullerene analog of C<sub>60</sub>“: D. Vanderbilt, J. Tersoff, *Phys. Rev. Lett.* **1992**, *68*, 511–513.
- [128] „Predicting experimentally stable allotropes: Instability of penta-graphene“: C. P. Ewels, X. Rocquefelte, H. W. Kroto, M. J. Rayson, P. R. Briddon, M. I. Heggie, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **2015**, *112*, 15609–15612, zit. Lit.
- [129] Diese sehr wichtige, bahnbrechende Veröffentlichung, die vielleicht ungenügend zitiert ist, ist: „Chemical graphs. VI. Estimation of the relative stability of several planar and tridimensional lattices for elementary carbon“: A. T. Balaban, C. C. Rentia, E. Ciupitu, *Rev. Roum. Chim.* **1968**, *13*, 231–247; Erratum: A. T. Balaban, C. C. Rentia, E. Ciupitu, *Rev. Roum. Chim.* **1968**, *13*, 1233.
- [130] Ein exzellerter, ausgewogener Beitrag zur Geschichte und Vorgeschichte von Graphen: „From Conception to Realization: An Historical Account of Graphene and Some Perspectives for Its Future“: D. R. Dreyer, R. S. Ruoff, C. W. Bielawski, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2010**, *49*, 9336–9344; *Angew. Chem.* **2010**, *122*, 9524–9532.
- [131] Anonymer Gutachter dieses Essays.
- [132] „Honesty to the Singular Object“: R. Hoffmann in *Sprache, Lügen und Moral: Geschichtenerzählen in Wissenschaft und Literatur* (Hrsg.: M. A. Safir), Suhrkamp Insel, Frankfurt, **2009**, S. 84–110; R. Hoffmann in *Storytelling in Science and Literature* (Hrsg.: M. A. Safir), Bucknell University Press, Lewisburg, **2015**, S. 55–74.
- [133] R. K. Merton, Vorwort in E. Garfields *Citation Indexing – Its Theory and Application in Science, Technology, and Humanities*, Wiley, **1979**, S. v–ix.
- [134] An anderer Stelle drückt Merton diese Idee so aus: „Der bibliographische Vermerk, der Verweis zu einer Quelle, ist nicht bloß eine Anstandsnote, angefügt in Form hochgebildeten Schmuckwerks. (Das er so gebraucht – oder missbraucht – werden kann, negiert nicht den Kern seines Gebrauchs.) Der Literaturverweis ist sowohl instrumentellen als auch symbolischen Funktionen dienlich, nämlich in der Weitergabe und Vergrößerung von Wissen. Instrumentell verweist er uns auf Arbeiten, die wir womöglich nicht kannten und von denen uns manche von Nutzen sein könnten; symbolisch beurkundet er das intellektuelle Eigentum der Quelle, indem er dem darin vorgebrachten Wissen ein Stück Anerkennung erbt – ob nun in Zustimmung oder in ausgedrückter Ablehnung.“ R. K. Merton, *Isis* **1988**, *79*, 606–623.
- [135] Hat man mit diesem Spiel erst einmal begonnen, fällt es schwer, wieder aufzuhören. Unsere Formulierung im Titel, „homo citans“, hat eine gewisse Verbreitung in der bulgarischen und slavischen Literaturkritik. Siehe unter anderem: N. Georgiev, *Tsitirashtat chovek v hudojestvenata literatura*, Sofia, Universitetsko izdatelstvo „Sv. Kliment Oridski“, **1992** (Volltext in Bulgarisch: <http://litternet.bg/publish/ngeorgiev/cit/content.htm>); N. Georgiev, *Homo citans in Literature*, Sofia, **1980** (dies ist in der vorigen Stelle zitiert, scheint aber eine ältere, nicht auffindbare Schrift des Autors zu sein); D. Chavdarova, *Homo legens v ruskoy literature XIX veka*, Shumen, Aksnos, **1997**; D. Chavdarova, Shpon’ka i Oblomov – Otsutstvie Chtenia (Otkaz ot Chtenia), in Russisch, *Russian Literature* **2001**, 315–323 (2001); D. Czawdarowa, Homo Legens (Homo citans) – Homo faber, in *Studia Rossica II*; Związki interdyscyplinarne w badaniach rusycystycznych: materiały konferencji naukowej (18–19 listopada 1993 r.) pod red. Naukow. W. Skrundy, W. Zmarzer, Warszawa, **1994**, S. 45; „Literature as a factor in man’s spiritual life in the 1830s–1850s“ (basierend auf dem Vorwort der Erinnerungen von A. A. Grigoriev „My literary and moral wanderings“) (in Russisch), A. N. Larionova, *Philol. Cult.* **2015**, *39*, 186–190.

Eingegangen am 22. Januar 2016,  
veränderte Fassung am 1. März 2016  
Online veröffentlicht am 20. Juli 2016  
Übersetzt von Prof. Henning Hopf, Braunschweig