

Das System für die Indexierung organisch-chemischer Reaktionen

I. URBÁNKOVÁ

*Forschungsinstitut für Pharmazie und Biochemie,
130 60 Prag*

Eingegangen am 5. Mai 1976

Für die mechanisierte Ein- und Ausgabe von Informationen über organisch-chemische Reaktionen muß die Form des Reaktionsschemas erhalten bleiben und die Speicherung und das Aufsuchen dieser Informationen muß auf den Partialstrukturen begründet sein, die bei der jeweiligen Reaktion verändert werden. Ein nach diesem Prinzip angeordnetes System dient zur Ausführung von Recherchen über neue präparative Verfahren in der organischen Chemie.

In the mechanized input and output of information in the field of organic reactions the form of the reaction scheme must be maintained. The storage and retrieval of this information is based on partial structures which are subject to changes brought about by the given reaction. The described system, based on this principle, serves as a tool in the search for new preparative processes used in organic chemistry.

При механизированном входе и выходе информации в области органических реакций должна соблюдаться форма реакционной схемы. Хранение и извлечение этих данных основано на тех частичных структурах, которые претерпевают изменения в данной реакции. Описанная система служит для разыскивания новых препаративных процессов в органической химии.

Die Indexierung der Reaktionen bereitet größere Schwierigkeiten als die Indexierung von einzelnen Verbindungen, wo die Verbindung durch ihren Namen oder die Strukturformel oder durch beide definiert werden kann. Es gibt zwei verschiedene Wege zur Beschreibung der Reaktionen, und zwar die Kodierung der beteiligten Verbindungen und die Kodierung der Partialstrukturen. Obwohl die chemische Gleichung eine anschauliche Methode zur Mitteilung von Reaktionsangaben darstellt, ist es kompliziert, die Information so zu verarbeiten, daß sie von verschiedenen Gesichtspunkten leicht zugänglich ist.

Der mechanisierte Zutritt produziert ein nutzbares System in dem Fall, wenn er auf den Fragmentationskode appliziert ist, in dem die Fragmente mit einer fixierten Indexierungsposition verbunden sind. Dieser Eintritt hat nur einige Applikationen — Reaktionskartei des Dokumentationsrings [1—3], Ziegler System [4, 5] und das System, welches in unserem Institut entwickelt wurde [6, 7]. Die Fragmentationskodes sind sehr zweckmäßig für die Kodierung der Partialstrukturen; topologische Kodes hat in diesem Sinne nur Lynch u. Mitarb. verwendet [8—11]. Besonders mit der programmierten organischen Synthese, die in den letzten Jahren von Corey

u. Mitarb. und anderen erarbeitet worden ist, kommt einer geeigneten Indexierungsmethode große Bedeutung zu [12—14].

Aspekte der Reaktion

Die organisch-chemische Reaktion umfaßt eine Reihe von Aspekten: Ausgangs-substanzen, Endprodukte, reagierende Bindungen, angewandte Reagenzien und Reaktionsbedingungen. Werden Reaktionen als Umwandlungen der Reaktionszentren des Moleküls betrachtet, kann jede Reaktion durch zwei Grenzpunkte bezeichnet werden, und zwar durch das in die Reaktion eintretende und durch das in der Reaktion gebildete Strukturelement (d. h. durch die funktionelle Gruppe der Ausgangs- sowie die funktionelle Gruppe der Endverbindung). Dabei werden die Molekülteile, die an der Reaktion nicht direkt beteiligt sind, vernachlässigt. So wird die Funktionsänderung — Verschwinden einer Funktion der Verbindung, die in die Reaktion eingetreten ist, und Entstehen einer neuen Funktion beim Endprodukt — zur Grundlage der Beschreibung für die Notation der organisch-chemischen Reaktionen gemacht.

Beschreibung des Kodes

In unserem Institut wurde bereits im Jahre 1958 ein Kode für die mechanisierte Verarbeitung sämtlicher organischer Reaktionen zusammengestellt, der auf der Veränderung von Funktionen in organischen Verbindungen basierte. Unter dem Begriff Funktion versteht man die Anordnung am Träger-Kohlenstoffatom (z. B. Aldehydfunktion —CHO; Carboxyl —COOH; Keton —CO u. ä.). Der ganze Komplex der Reaktionen wurde auf Randlochkarten verarbeitet. Jede einzelne Notation beinhaltet die bei der Reaktion entstehende Funktion, die bei der Reaktion verschwindende Funktion, die Umgebung der entstehenden Funktion, den Reaktionstyp, die Reagenzien und die Stoffgruppe, zu der die entstehende Verbindung gehört.

Der Kode der Funktionen beruht auf dem Umstand, daß die Funktionen von einigen sich öfter wiederholenden Fragmenten gebildet werden. Es besteht aus 6 Buchstaben (C, N, S, O, H, X) und 10 Ziffern (0, 1, 2, 3, 4, ... 9). Jede Funktion wird durch eine Kombination von zwei Buchstaben und drei Ziffern ausgedrückt. Ringschluß bei der Reaktion wird vorrangig bezeichnet. Der Kode für das Ringsystem ist derselbe wie für das System der Funktionen, nur wird bei den Ringen ein vorgestelltes Symbol gelocht, wodurch sie sich von den Funktionen unterscheiden.

Die Umgebung der Funktion charakterisiert die gebildete Verbindung als aliphatische, gesättigte oder ungesättigte, alizyklische, aromatische oder heterozyklische bzw. als Kombination der genannten Möglichkeiten. Von acht Symbolen

werden immer drei gekerbt. Das vierte Kriterium beschreibt eingehender die grundlegenden Reaktionstypen, z. B. Polymerisation, Addition, Substitution usw. Ein weiterer Gesichtspunkt beschreibt den Typ des bei der Reaktion angewandten Reagens oder Katalysators. Unter Reagens versteht man eine solche Substanz, die zur Durchführung der Reaktion notwendig ist, aber in die entstehende Substanz nicht unmittelbar eintritt. Nach dieser Definition ist Chlor bei Chlorierungen kein Reagens im erwähnten Sinne, sondern eine Reaktionskomponente; ebenso das Grignard-Reagens. Die Reagenzien werden nach dem wichtigsten Atom im Molekül, das für die entsprechenden Eigenschaften der ganzen Verbindung verantwortlich ist, klassifiziert (so gilt bei Kaliumhydroxid das Kalium als Hauptatom, in Schwefelsäure Schwefel usw.). Die Reagenzien sind nach dem periodischen System angeordnet und mit Zahlen gekennzeichnet.

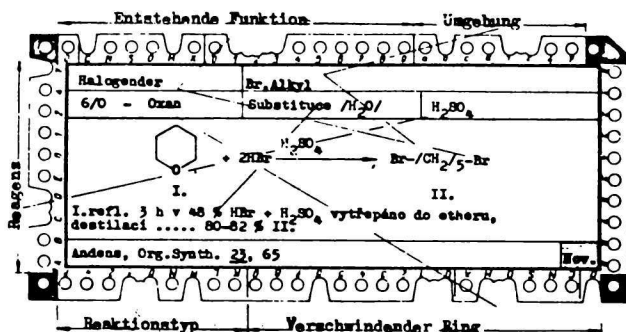


Abb. 1. Eine Musterkarte des Systems.

Das letzte Kriterium reiht die entstandene Verbindung in eine bestimmte Gruppe organischer Substanzen, die vom pharmazeutischen Gesichtspunkt wichtig sind, ein. So werden Verbindungen vom Terpencharakter, Zucker, Glykoside, Steroide, Aminosäuren, Peptide u. a. unterschieden (Abb. 1).

Umfang und Organisation des Systems

Bisher wurden sämtliche Monographien über organisch-chemische Reaktionen bearbeitet (d. h. W. Theilheimer, *Synthetic Methods of Organic Chemistry*, Bd. 1—28, *Organic Syntheses*, 5 Sammelbände, Bd. 37—54, *Organic Reactions*, Bd. 1—21 u. a.) und laufend ca. 15 Originalzeitschriften. An der Aufbereitung beteiligen sich auch die Informationszentren der pharmazeutischen Industrie in der DDR und PVR. Derzeit ist der Zuwachs neuer präparativer Methoden im Vergleich zur Zunahme an organischen Verbindungen kleiner, da eine Reihe davon nach bereits bekannten Reaktionsverfahren dargestellt wird.

Sortieren und Ausführung von Recherchen

Nach Bedarf führt unsere Informationsstelle Recherchen durch, und zwar vorwiegend für Mitarbeiter unseres Institutes, dann für Betriebe und auch für andere Institutionen. Die Bestellung einer Recherche erfolgt in Form des Reaktionsschemas, das dann der Informations-Spezialist in den Kode übersetzt, worauf die entsprechenden Angaben aussortiert werden. Zur einfacheren Manipulation mit der Reaktionskartei kann man manche häufiger vorkommende Funktionen (Schlagwörter) vorsortieren, so daß dann bei der Recherche nicht das gesamte Material selektiert werden muß.

Selektor

Derzeit wird der Universal-Vibrationsselektor für das Aufsuchen benutzt. Sein Speicher kann nicht nur für die eigentliche Selektion, sondern bei einem größeren Fonds auch zur direkten Speicherung des Materials verwendet werden. Die Selektion erfolgt rasch, aus dem vollbesetzten Speicher werden die gewünschten Angaben binnen 10—15 Sekunden herausgeschoben.

Erneut muß erwähnt werden, daß sich unser System nicht zur Ermittlung von Informationen über die Darstellung einzelner Verbindungen, sondern zum Aufsuchen allgemeinerer Reaktionsschemata sowie analoger Reaktionsverfahren, verschiedener Bedingungen oder verschiedener Arten von Reagenzien bei Reaktionen, Einführung funktioneller Gruppen in Grundskette usw. eignet. Der Vorteil beruht in der sehr raschen Durchführung der Recherchen, in der Möglichkeit der Kombination von verschiedenen Gesichtspunkten und in den geringen Kosten der Einrichtung.

Literatur

1. Scheublein, M., Steidle, W., German, W., Nübling, W. und Wilhelm, R., *Naturwissenschaften* **55**, 362 (1968).
2. Nübling, W. und Steidle, W., *Angew. Chem.* **82**, 618 (1970); *Angew. Chem., Int. Ed. Engl.* **9**, 8 (1970).
3. Schier, O., Nübling, W., Steidle, W. und Walls, J., *Angew. Chem.* **82**, 622 (1970).
4. Ziegler, H. J., *Inform. Chim.* **41**, 22 (1966).
5. Ziegler, H. J., *J. Chem. Doc.* **6**, 81 (1966).
6. Peřina, Z., *Metodika a technika informací* **1960**, 61.
7. Urbánková, I., *Chem. Listy* **62**, 641 (1968).
8. Armitage, J. E. und Lynch, M. F., *J. Chem. Soc., C*, **1967**, 521.
9. Armitage, J. E., Crove, J. E., Evans, P. N., Lynch, M. F. und McGuirk, J. A., *J. Chem. Doc.* **7**, 209 (1967).
10. Lynch, M. F., *Endeavour* **27**, 68 (1968).
11. Harrison, J. M. und Lynch, M. F., *J. Chem. Soc., C*, **1970**, 2082.
12. Corey, E. J. und Wipke, W. T., *Science* **166**, 178 (1969).
13. Corey, E. J., *Quart. Rev., Chem. Soc.* **25**, 455 (1971).
14. Bočková, H. und Urbánková, I., *Chem. Listy*, im Druck.

Übersetzt von E. Tůmová