

BIBLIOTHEKSEINFÜHRUNG - LITERATURSUCHE

Experimentelle Forschungsergebnisse aus dem Bereich der Naturwissenschaften werden in Journalen, die wöchentlich, 2-wöchentlich, oder monatlich erscheinen in Form sog. Publikationen ("papers"), die in Umfang und Ausführlichkeit variieren, veröffentlicht.

Im Bereich der organischen Chemie geht es dabei um Aussagen zu physikalisch-chemischen, sowie spektroskopischen Eigenschaften von Verbindungen, ihrer Reaktivität und in weiterer Folge praktische Überlegungen zur Analyse, Reinigung und evt. technischer oder medizinischer Anwendung. Darüber hinaus werden, speziell auf dem Gebiet der organischen Synthesechemie, vor allem Arbeitsvorschriften zur Herstellung neuer Verbindungen, oder bekannter Verbindungen nach neuen Methoden publiziert. Das wesentliche Ziel dabei ist es, komplexe, meist polyfunktionelle Moleküle mit definierter Stereochemie in hoher Selektivität und Ausbeute chemisch rein zu gewinnen und sie spektroskopisch zu charakterisieren. Oft handelt es sich dabei um mehrstufige Synthesen, die aus einer oder mehreren leicht erhältlichen oder käuflichen Ausgangsverbindungen ein Zielmolekül, oder in analoger Weise eine Gruppe von Zielmolekülen zugänglich machen.

Literatur wird meist auf folgende Art angegeben:

Maier, X.; Bauer, Y.; Müller, Z. *J. Am. Chem. Soc.* **1995**, *102*, 2346(-2354).

[früher: X. Maier, Y. Bauer and Z. Müller, *J. Am. Chem. Soc.*, **102**, 2346, (1995).]

Die unten stehenden *Journale* sind in der Bibliothek für Physik und Chemie*, Boltzmann-gasse 5, 4. Stock (meist vollständig) in Buchform gebunden oder als lose Hefte vorhanden und/oder elektronisch zugänglich.

*) Adresse:

Österreichische Zentralbibliothek für Physik & Fachbereichsbibliothek Chemie
Boltzmann-gasse 5

Mo, Di, Mi 08.00-17.30 Uhr

Do 08.00-18.00 Uhr

Fr 08.00-17.30 Uhr

Lesesaal 5. Stock: Mo - Fr 8.00 - 22.00 Uhr

Journal	site	
J.Am.Chem.Soc.	http://pubs.acs.org/about.html	
J.Org.Chem.		
Org.Lett.		
Organometallics		
Tetrahedron	http://www.sciencedirect.com/	
Tetrahedron Lett.		
Tetrahedron:Asymm.		
J.Chem.Soc. (Perkin 1) --- -----Org. & Biomol. Chem.	http://www.rsc.org/Publishing/Journals/	
J.Chem.Soc. (Perkin 2)		
J.Chem.Soc.(Chem. Commun.)		
Angew.Chem.	http://www3.interscience.wiley.com/cgi-bin	
Chem.A Eur.J.		
Chem.Ber.--- Eur.J.Inorg.Chem.		
Liebigs Ann. --- Eur.J.Org.Chem.		
Synthesis	http://www.thieme-chemistry.com/thieme-chemistry/	
Synlett		
J. Organomet. Chem.	http://www.sciencedirect.com/	
Helv.Chim.Acta	http://www3.interscience.wiley.com/cgi-bin	
Bull.Chem.Soc. Jpn.	http://www.jstage.jst.go.jp/browse/bcsj/_vols	
Chem.Lett.	http://www.jstage.jst.go.jp/browse/cl	
Monatsh.Chem.	http://www.springer.com/chemistry/journal/706	

Wenn Artikel benötigt werden, die nur in gedruckter Form vorhanden sind, so muss der entsprechende Band in der Bibliothek angefordert werden. Es kann dann die entsprechende Literaturstelle in der Bibliothek kopiert werden. Die Journale selbst dürfen nicht entlehnt, d.h. aus der Bibliothek entfernt werden.

Für den Synthetiker sind vor allem folgende

Typen von Publikationen

in periodischen Druckschriften ("Primärliteratur" z.T auch in elektronischer Form zugänglich) interessant:

Full papers sind ausführliche Publikationen, z.T. sehr umfangreich, mit einem detaillierten Experimentalteil, in dem die Synthese jeder einzelnen Verbindung und ihre spektroskopischen Daten angegeben sind. Die Gliederung hält sich meist an folgendes Schema:

Titel - Namen der Autoren - Adresse (in letzter Zeit auch mit e-mail) - Abstract - Einleitung - Resultate und Diskussion derselben mit Schlußfolgerungen oder →eigener Abschnitt - Conclusions - Summary (etwas detaillierter als Abstract, manchmal auch mit "Ausblick"). Daran schließt sich ein experimenteller Teil, der meist in zwei Abschnitte unterteilt ist: Vorangestellt ist ein allgemeiner Teil ("General"), wo sich Angaben zu Geräten, Meßmethodik, sowie Qualität der verwendeten Chemikalien und LM bzw., deren Reinigung finden und auch Literaturangaben zu nicht käuflichen Vorstufen. Daran schließen die individuellen Arbeitsvorschriften an. Den Abschluß macht eine mehr oder weniger umfangreiche Liste von Literaturzitate (References & Notes), gelegentlich, meist bei älteren Jahrgängen, auch als Fußnoten.

Im Hauptteil ("Results & Discussion") finden sich neben Abbildungen und Tabellen auch Formelschemata (häufig mit Reaktionsbedingungen), in denen den einzelnen Verbindungen zur besseren Übersichtlichkeit fortlaufende Nummern zugewiesen sind, die auch im Text verwendet werden und im Experimentalteil dem (meist langen und unübersichtlichen) IUPAC-Namen nachgestellt sind.

Letters oder Communications sind kurze Mitteilungen, meist nur 1-4 Seiten, denen die oben genannte Gliederung fehlt. Es handelt sich dabei oft um Publikation einer neuen, praktischeren, in unserem Fall synthetischen Methode, die typischerweise anhand mehrerer strukturell ähnlicher Beispiele in Tabellenform vorgestellt wird. Reaktionsbedingungen finden sich nur in den Schemata oder in den Tabellen als Fußnote. Gelegentlich ist eine allgemeine Arbeitsvorschrift in den Endnotes angegeben. Diese sind im Rahmen des Praktikums nur bedingt zu gebrauchen, da die Anwendung von Analogvorschriften einiges an Erfahrung voraussetzt. In letzter Zeit gibt es die Möglichkeit auf Zusatzinformationen (Supplementary Material, Supporting Information) zuzugreifen. Diese sind nur in elektronischer Form (pdf-file) verfügbar und frei zugänglich und enthalten z.T. detaillierte AV und spektroskopische Daten.

Sehr nützlich sind Übersichtsartikel ("Reviews"). Sie erscheinen in vielen Zeitschriften, jeweils am Beginn eines Heftes, zu einem bestimmten Thema (z.B. Substanzklasse, Reaktionstyp) und beschreiben Neuentwicklungen auf diesem Gebiet seit dem letzten zu dieser Thematik erschienen Review. Bei synthetischen Themen wird auf alle publizierten Synthesen anhand von

Formelschemata und Literaturzitate verwiesen. Diese sind gelegentlich sehr umfangreich mit über hundert Seiten und mehreren hundert Literaturstellen der Originalliteratur. Sie sind sehr hilfreich, um sich, speziell auf einem neuen Arbeitsgebiet, einen ersten Überblick zu verschaffen. Es gibt auch eigene Review-Zeitschriften, die ausschließlich diese publizieren: *Chem. Reviews*, *Chem. Society Reviews*, etc. Weitere findet man in Reihenwerken ("Advances in.....", "Topics in..... etc.) und Fachbüchern neueren Datums.

Eine sehr wertvolle Buchreihe sind die Organic Synthesis, die ausgearbeitete und von unabhängigen Fachleuten überprüfte Synthesen enthalten. Die Ausbeuten sind meist realistischer, die Vorschriften ausführlicher und die von den Überprüfenden als "Notes" beigegebenen Erfahrungen hilfreich. Die ersten Jahrgänge wurden später in 5 Collective Volumes + Index zusammengefaßt. Die späteren Bände sind jährlich erschienen. Es gibt eine uns zugängliche elektronische Version mit brauchbaren (selbsterklärenden) Suchmöglichkeiten (<http://www.orgsyn.org/>).

Ein weiteres, sehr umfangreiches Reihenwerk ist der sog. Houben-Weyl "Methoden der Organischen Chemie" (blau und silber-blau) in dem Herstellungsmethoden für verschiedene Substanzklassen und ihre Weiterreaktionen gesammelt sind. Zu den meisten Bänden sind bereits Ergänzungsbände erschienen. Interessant ist vielleicht, dass in den ersten Bänden allgemeine Laboroperationen inkl. (klass.) Analyse sehr detailreich beschrieben sind.

Weiters gelegentlich brauchbar.....

S. Patai Buchreihe mit einzelnen Bänden zur Einführung funktioneller Gruppen, bzw. Eigenschaften und Reaktivität dieser Substanzklassen.

Fieser & Fieser: "Organic Reagents" listet Reagenzien alphabetisch mit Anwendungsbeispielen auf, jährlich erscheinende Ergänzungsbände.

Perrin & Armarego: "Purification of Laboratory Chemicals"

Alle oben genannten Reihenwerke sind auch in der Bibliothek für Physik und Chemie vorhanden, entweder im Hauptraum in Regalen aufgestellt oder in (nicht frei zugänglichen) Magazinen. Sie können jederzeit eingesehen und kopiert, aber nicht entlehnt werden. Bitte wenden Sie sich an den (die) Bibliothekar(in) vor Ort.

Wie findet man eine geeignete Literaturstelle für eine bestimmte Synthese?

Hier können die beiden großen Referenzwerke herangezogen werden, die über geeignete Suchalgorithmen verfügen. Beide sind als Datenbank verfügbar. Es sind dies

A) **Chemical Abstracts (CA)** → **Scifinder**

B) **Beilstein + Gmelin** → **Reaxys**

A) verzeichnet alle Abstracts aus referierten chemisch orientierten Zeitschriften;

B) verzeichnet alle publizierten organischen Verbindungen. Die Ordnung erfolgte in der ursprünglichen gedruckten Version - nach Substanzklassen bzw. Derivaten, umfaßte 27 Bände und musste in der Folge um 5 Ergänzungswerke, zuletzt bis 1979, die wesentlich umfangreicher sind als das Hauptwerk, erweitert werden. Die letzten Decenien existieren aber *nur* in elektronischer Form. Die Druckausgabe wurde ab 1998 eingestellt (vgl. <http://www.biblio.tu-bs.de/ausstellungen/beilstein/beilstein.html>).

Ein analoges Werk aus dem Bereich der anorganischen Chemie ist der "Gmelin". Die Information aus beiden Werken wurde kürzlich in der Datenbank "Reaxys" vereinigt

In beiden Werken kann man nach

Summenformel, Schlüsselworten (Key words), Nomenklaturnamen, Autorennamen suchen, in den CA auch im Patentindex.

Wesentlich ist aber, dass die elektronischen Versionen auch eine Suche nach Strukturformeln und Partialstrukturformeln erlauben. Überdies kann nach Reaktionen gesucht werden. Wir werden im Rahmen des Praktikums vor allem letztere Eigenschaften nützen.

Generell geht man dabei so vor, dass man nach Aufrufen des Programms einen Formeleditor öffnet und die Zielverbindung zeichnet und als solche definiert. Eine Suche liefert dann alle bekannten Synthesen, bei denen dieses Produkt entsteht, möglicherweise auch nur als Nebenprodukt. Man kann dann weiter einschränken, z.B. auf einen bestimmten Reaktionstyp, Ausbeute, Alter der Publikation u.v.m.

Zugangsmöglichkeiten zu den Datenbanken:

Scifinder

von allen Instituts-PC (Aufenthaltsräume)

Terminalraum Physikalische Chemie (soweit nicht für LV) benötigt

PC in der Fachbereichsbibliothek Physik – Chemie, sowie

private Notebooks (LAN, Voraussetzungen: Uni Account mit Passwort)

Von allen oben genannten Rechnern ist die Web-Version des Scifinders verfügbar.

Voraussetzungen: Uni Account mit Passwort

Installation eines VPN-Zugangs auf dem Rechner

Installation von JAVA

Beantragung eines Usernamens und Passwort auf Scifinder – Website

Bestätigung per e-mail

dazu gehe ...

Uni→UB→elektron. Ressourcen→Datenbanken→Auswahl→Chemical Abstracts Scifinder.

dort finden Sie:

Die Webversion von SciFinder

Ab sofort steht Ihnen SciFinder Scholar auch via Browser (z.B. Internet Explorer, Firefox) im Web zur Verfügung. Dazu ist eine einmalige persönliche Registrierung notwendig:

Schritt 1: Persönliche Registrierung bei CAS (einmalig)

<https://scifinder.cas.org/registration/index.html?corpKey=4E5B5E59-86F3-50AB-24AA-00B81919D167>

Schritt 2: Registrierung bestätigen (einmalig)

Als Ergebnis der Registrierung erhalten Sie kurz darauf ein E-Mail. Durch Klick auf den im E-Mail angegebenen Link innerhalb von 48 Stunden bestätigen Sie die Nutzungsbedingungen und werden für die Benutzung der SciFinder Webversion freigeschaltet.

Schritt 3: Einloggen auf SciFinder Website

Danach können Sie sich mit den in Schritt 1 gewählten Logindaten sofort auf der SciFinder Website einloggen:

<http://scifinder.cas.org>

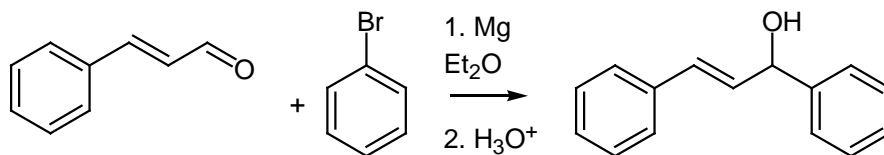
Anwendungshinweis: Die Webversion des SciFinder ermöglicht das Zeichnen chemischer Strukturen. Dafür ist ein Java-Plugin erforderlich, das auf Ihrem Rechner installiert sein muss. Details dazu finden Sie auf der Website <http://www.cas.org/misc/downloads/jreplugin.html>

B) Reaxys

dazu gehe: Uni → UB → elektron. Ressourcen → Datenbanken → Auswahl von **Reaxys** → Start

Voraussetzungen: Uni-account mit Passwort
Installation eines VPN-Zugangs auf dem Rechner
Installation von JAVA

Literatursuche für 1,3-Diphenylprop-2-en-1-ol (herzustellen durch eine) Grignardreaktion:



Chem.ABSTRACTS/Sci-finder

Kurzanleitung:

1. Scifinder in der Web-Version öffnen (<https://scifinder.cas.org/scifinder>)
2. Explore Reactions
3. Im Formeleditor die Reaktionsgleichung zeichnen (mit Reaktionspfeil)
4. Als exakte Struktur, d.h keine Partialstruktur definieren, in der Reaktionsdatenbank suchen.
5. Bei großer Anzahl von Hits einschränken, am besten nach "Sprache", "Publikationstyp", "Publikationsjahr" aufgrund der vorgegebene Informationen.
5. Die wenigen gefundenen Lit.zitate können nun eingesehen werden als
 - a) Abstract
 - b) Full Text (führt auf die Web site des Journals, oft findet sich eine AV erst in der Supporting Information)

b) ist nur möglich, wenn eine elektronische Version existiert und diese durch die UB freigeschalten ist. Ansonsten muss die Hardcopy der Bibliothek verwendet werden. Die

Publikation kann als pdf-file ausgedruckt werden, oder mit copy/paste partiell in ein Textprogramm übernommen werden.



1,3-Diphenylprop-2-en-1-ol.

To a stirred solution of phenylmagnesium bromide, prepared from Mg (6.07 g) and bromobenzene (39.3 g), in dry ether (300 mL) was added dropwise a solution of cinnamaldehyde (33 g) in dry ether (50 mL) over 15 min. The mixture was allowed to stir for an additional hour at 25 °C and then was quenched with saturated NH₄Cl. The aqueous layer was extracted once with ether and the combined ether extracts were washed twice with water, twice with brine, and dried over Na₂SO₄. Removal of the ether in vacuo afforded the alcohol (50.6 g) as a low-melting solid which was used directly in the next step. ¹H NMR (CDCl₃): δ 2.39 (s, 1 H), 5.25 (d, J = 5 Hz, 1 H), 6.3-6.55 (m, 2 H), 7.22-7.40 (m, 10 H).

Reaxys

Eine analoge Suche kann auch im Beilstein/Reaxys durchgeführt werden. Das Programm funktioniert ähnlich dem Sci-finder, Aufruf erfolgt über die Website der UB (<https://dbs.univie.ac.at/?aid=1911;f=1600>). Es ist auf sorgfältige Eingabe zu achten; so ist im konkreten Beispiel das Grignard-Reagenz **ionisch** zu definieren.

Reaxys Suche ist vor allem zu empfehlen, wenn Eigenschaften zu einer Verbindung gesucht werden, z.B. Schmelzpunkt, Dichte, spezifische Drehung, etc., da sie als "Felder" blockweise zusammengefasst dargestellt werden.

In beiden Datenbanken kann auch nach Herstellern für Ausgangsmaterialien, inkl. Preisen gesucht werden.

Bei der endgültigen Entscheidung für eine Synthese ist zu beachten:

- ◆ Wie schwierig ist die Durchführung?
- ◆ Wie teuer ist die Synthese?
- ◆ Kann ich sie (technisch und finanziell) mit meinen Möglichkeiten realisieren?
- ◆ Wie viele Stufen sind nötig (Zeit!)?
- ◆ Wie gut sind die Ausbeuten?
- ◆ Ist diese Literaturstelle verlässlich (alt, ungenau beschrieben nur als Commun.)?
- ◆ Ist die Literaturstelle vorhanden oder ist eine Beschaffung möglich?