

## **Die Nutzung von Datenbanken und der Bibliothek aus Sicht der Organischen Chemie**

Im Netz findet sich eine pdf-Version dieser Zusammenstellung mit kopierbaren Internetadressen:

<http://www.ioc.kit.edu/103.php>

Diese Übersicht soll Sie in die Lage versetzen, eine z. B. im Praktikum benötigte literaturbekannte Synthese zu ermitteln und die entsprechende Literatur aufzufinden. Darüber hinaus wird erläutert, wie Sie zu einem bestimmten Themengebiet relevante Literatur und/oder Informationen finden können.

Prinzipiell unterscheidet man *Primärliteratur* (in der über Forschungsergebnisse berichtet wird), *Sekundärliteratur* (in der viele Fakten aus der Primärliteratur zusammengefasst sind) und *Datenbanken*. Die Sekundärliteratur lässt sich weiter unterteilen in Übersichtsartikel (Reviews), Bücher, Kompendienwerke und Buchserien, wobei die Einteilung oft nicht eindeutig ist.

Primärliteratur werden Sie zu Rate ziehen, wenn Sie eine unfiltrierte Information suchen; z. B. eine Vorschrift zur Herstellung einer Substanz oder die NMR-spektroskopischen Daten einer Verbindung. Wenn Sie genaue, umfassende und vor allem aktuelle Informationen zu einem Thema suchen, werden Sie nicht umhinkommen, die Primärliteratur zu sichten.

Wenn Sie schnell einen Überblick über ein Thema bekommen wollen, wird die Suche nach einem Übersichtsartikel, einem Buchartikel oder einem Kompendium für Sie an erster Stelle stehen. Hieraus können Sie bei Bedarf über die dort zitierte Literatur auch die Primärliteratur finden.

Datenbanken helfen Ihnen, die von Ihnen gesuchte Primär- oder Sekundärliteratur zu finden.

### **Datenbanken**

Die meiste von Ihnen benötigte Literatur werden Sie mit Hilfe der **SciFinder**-Datenbank finden. Sie können hier nach Themen (z. B. Swern oxidation, biaryl coupling etc.), Autoren, Verbindungen oder Reaktionen suchen. Das gefundene Suchergebnis können Sie verfeinern (z. B. nur Übersichtsartikel anzeigen oder nur Literatur ab 2001) und sie können in Einzelfällen direkt über das Netz die entsprechende Literatur ansehen. Bitte beachten Sie aber, dass das Ausdrucken von Literatur im Computerraum nicht gestattet werden kann.

Im SciFinder sind nicht nur Primärliteratur erfasst, sondern auch Übersichtsartikel, Bücher, Patente und zum Teil auch Kompendienwerke. Da zehntausende von Journalen regelmäßig indiziert werden, ist ein Großteil (!) der Journale für Sie faktisch nicht auffindbar. Die Zusammenfassungen (Abstracts) im SciFinder sind aber für "unbedeutende" oder "fremdsprachige" Journale besonders ausführlich, z. T. enthalten sie sogar vollständige Experimentalvorschriften.

Zusätzliche Information finden Sie unter <http://www.ubka.uni-karlsruhe.de/datenb/uni/index.html>

Die **Reaxys**-Datenbank hat zwar deutlich weniger Primärliteratur erfasst, diese aber dafür genauer. Sie können beispielsweise nach Literatur suchen, in der der Schmelzpunkt einer Verbindung angegeben ist oder nach dem  $pK_s$ -Wert einer Substanz.

Zusätzliche Information finden Sie unter <http://www.ubka.uni-karlsruhe.de/datenb/uni/index.html>

In vielerlei Hinsicht dem SciFinder ähnlich ist **Web of Science**, vor allem können Sie hier aber Meta-Information finden. Zu wissen, wer eine Arbeit zitiert hat oder welche Arbeit ähnliche Zitate enthält, kann sehr nützlich sein, wenn man sich in ein neues Thema einarbeitet. Die Nutzung ist denkbar einfach, Abfragen mit Formelschemata sind aber nicht möglich: <http://www.ubka.uni-karlsruhe.de/datenb/uni/index.html>

Auf dem Campus ist auch der Zugang zur ähnlichen Datenbank scopus freigeschaltet: [www.scopus.com](http://www.scopus.com)

### Primärliteratur

Hierzu gibt es nicht viel zu sagen, außer dass viele Journale vom Campus der Universität aus im Netz freigeschaltet sind. "Vom Campus aus" bedeutet, dass Sie die Literatur in der Regel nicht zu Hause ansehen können. Eine Übersicht über die zugänglichen (und auch viele nicht zugänglichen) Journale finden Sie unter <http://rzblx1.uni-regensburg.de/ezeit/>.

### Bücher und Kompendienwerke

Die Grenze zwischen Bücher und Journalen ist fließend. Beispielsweise werden die Buchreihen *Organic Syntheses* (FBC 6: ZA 2303) oder *Organic Reactions* (FBC 6: ZA 3170), die in etwa jährlich erscheinen, häufig auch als Journale zitiert. Hier hilft Ihnen die Erfahrung; allgemeine Regeln zu formulieren, fällt schwer. *Organic Syntheses* enthält übrigens überprüfte, detaillierte und funktionierende (!) Experimentalvorschriften. Diese werden Sie im Zweifelsfall immer bevorzugen. *Organic Reactions* beschreibt in jedem Band einige Namensreaktionen sehr detailliert (über jeweils mehr als 100 Seiten).

Zu vielen Bereichen der organischen Chemie gibt es Kompendienwerke, die oft einen ausgezeichneten Einstieg in spezifische Themengebiete erlauben. Sehen Sie sich diese Kompendien einfach mal an, dann kennen Sie die jeweiligen Vorteile.

*Encyclopedia of Reagents for Organic Synthesis*, (Hrsg.: L. A. Paquette), John Wiley & Sons, Chichester, **1995**. 6.02: 95 E 936 und 6.02: 99 E 267.

*Comprehensive Organic Synthesis*, (Hrsg.: B. M. Trost, I. Fleming, C. H. Heathcock), Pergamon Press, Oxford, **1991**. 6.20: 91 E 857

*Comprehensive organic functional group transformations*, (Hrsg.: A. R. Katritzky), Pergamon Press, Oxford, **1995**. 6.20: 95 E 949

*Comprehensive heterocyclic chemistry II*, (Hrsg.: A. R. Katritzky), Pergamon Press, Oxford, **1996**, 6.48: 97 E 508

R. C. Larock, *Comprehensive organic transformations – a guide to functional group preparations*, 2. Aufl., Wiley, Weinheim, 6.02: 90 E 894(2).

### Lexika

Wenn Sie sich in ein Thema einlesen wollen, oder wenn Sie nur ein allgemeines "populärwissenschaftliches" Interesse an einer Fragestellung haben, dann ist meistens das "Römp" mit seinen verschiedenen Lexika der richtige Einstieg. Auf dem Campus ist der "Römp" als elektronische Ressource freigeschaltet: <https://roempp.thieme.de/>.

## Buchserien

Eine Übersicht über funktionelle Gruppen (pro funktionelle Gruppe mindestens ein Buch) bietet der Patai, der jetzt von Rappoport fortgeführt wird. Leider ist diese Serie etwas erratisch in den Regalen der Bibliothek verteilt, man findet aber dennoch meistens leicht, was man sucht. Erster Band: 6.10: 77 A 955. 1992 erschien eine Übersicht über alle Patai-Bände: *Patai's 1992 guide to the chemistry of functional groups*, (Hrsg.: S. Patai) 2. Aufl., Wiley, Chichester, **1992**. 6.10: ZA 5092-G.

Der Houben-Weyl, der jetzt als Science of Synthesis weitergeführt wird, bietet ebenfalls einen Überblick über Verbindungsklassen. Großer Vorteil hier: Nur praktikable Methoden sind erwähnt, zu allen Methoden finden sich auch Experimentalvorschriften. Standort ab 6.05: IV E 2323.

Leider nicht mehr online verfügbar.

## Suchen in der Bibliothek

Ob etwas in der Bibliothek vorhanden ist, lässt sich rasch übers Netz klären.

Unter [http://primo.bibliothek.kit.edu/primo\\_library/libweb](http://primo.bibliothek.kit.edu/primo_library/libweb) finden Sie eine Suchmaske. Günstig ist, wenn als Standort FBC (Fachbereichsbibliothek Chemie) angegeben ist.

## Nützliche Links:

Wissenschaftliche Suchmaschine: <http://scholar.google.com/>

Die IUPAC-Nomenklaturregeln: <http://www.acdlabs.com/iupac/nomenclature/>

Empfehlungen der IUPAC zum Zeichnen von Strukturen (**sehr** umfangreiche Regeln):  
<http://dx.doi.org/10.1351/pac200678101897> und <http://www.iupac.org/publications/pac/80/2/0277/>

Einfache Nomenklaturprobleme können in ChemDraw gelöst werden. Achtung – das Ergebnis muss mit Sachverstand geprüft werden.

Spektren-Sammlungen (NMR, IR, MS etc.): <http://sdfs.db.aist.go.jp>

Sammlung von  $pK_s$ -Werten: <http://www.chem.wisc.edu/areas/reich/pkatable/index.htm>  
und [http://evans.rc.fas.harvard.edu/pdf/evans\\_pKa\\_table.pdf](http://evans.rc.fas.harvard.edu/pdf/evans_pKa_table.pdf)

Der Thieme-Verlag sponsort eine Review-Liste (30,550 Einträge), die auch als txt-File durchsucht werden kann: <https://www.thieme.de/en/thieme-chemistry/journals-synthesis-reviews-downloads-55538.htm>

Definitionen und Begriffsklärungen finden Sie im „Römpf“ oder unter: <http://goldbook.iupac.org>

Duden online: <http://services.langenscheidt.de/bsb/>

## Richtig zitieren

Richtig zitieren ist essentiell! Wir legen im Rahmen des Seminars zum F-Praktikum großen Wert darauf, dass Sie korrekt zitieren. Hier kommt es auf jedes Komma an! Die Zitiermethoden in deutschen (siehe unten) und englischen/amerikanischen Journalen weichen geringfügig voneinander ab. Sie können beide Zitiermethoden verwenden; tun Sie dies aber dann konsequent. Wollen Sie sich über die amerikanische Zitiermethode informieren, schauen Sie z. B. in ein aktuelles Heft von *J. Org. Chem.*:

<http://pubs.acs.org/journals/joceaah/index.html>

**Zeitschriftenzitate:** Zeitschriftennamen vom letzten Autorennamen durch Komma abtrennen, nach CASSI (Chemical Abstracts Service, Series Index) abkürzen und kursiv setzen. Nach Zeitschriftennamen kein Komma, dann Veröffentlichungsjahr (fett), Komma, Bandnummer (kursiv), Komma, Anfangsseitenzahl, Punkt (innerhalb einer Zitatnummer Semikolon). Journale werden nach folgenden Listen abgekürzt:

<http://www.cas.org/content/references/corejournals> (Maßgeblich in Zweifelsfällen, aber unvollständig)

siehe auch: <http://cassi.cas.org/search.jsp>

### **Zeitschriften mit Bandzählung:**

B. Krebs, H. U. Hürter, *Acta Crystallogr. Sect. A* **1981**, 37, 163; G. Eulenberger, *Z. Naturforsch. B* **1981**, 36, 521.

### **Zeitschriften ohne Bandzählung:**

A. Kraft, *Chem. Commun.* **1996**, 77.

### **Bücher ohne Herausgeber:**

K. P. C. Vollhardt, *Organische Chemie*, 1. Aufl., VCH, Weinheim, **1988**, S. 215.

### **Bücher mit Herausgeber:**

T. D. Tullius in *Comprehensive Supramolecular Chemistry*, Bd. 5 (Hrsg.: J. L. Atwood, J. E. D. Davies, D. D. MacNicol, F. Vögtle, K. S. Suslick), Pergamon, Oxford, **1996**, S. 317.

Sollten Sie Ungewöhnliches zitieren wollen (Patente, Zeitungen, Dissertationen, Programme etc.), so konsultieren Sie die Vorschriften der Zeitschrift *Angewandte Chemie* oder sehen Sie in aktuelle Ausgaben dieser Zeitschrift ([www.angewandte.de](http://www.angewandte.de)).

## ChemDraw

Das Standard-Chemie-Zeichenprogramm ist als Vollversion als Campuslizenz verfügbar. Sie brauchen eine Standard-KIT-E-Mail-Adresse: <http://sitelicense.cambridgesoft.com/sitelicense.cfm?sid=1811>

## Endnote

Das Standard-Literaturverwaltungsprogramm ist als Vollversion als Campuslizenz verfügbar:

[http://blog.bibliothek.kit.edu/kit\\_bib\\_news/?p=757](http://blog.bibliothek.kit.edu/kit_bib_news/?p=757)