



Frei zugängliche, schnelle Suche nach chemischen Reaktionen

In den letzten Jahren haben strukturbasierte Chemiedatenbanken wie Beilstein, REACCS oder SciFinder enorm an Bedeutung für synthetisch arbeitende, organische Chemiker gewonnen. Diese gebührenpflichtigen Werkzeuge erleichtern den Zugang zu einer großen Menge wertvoller Informationen. Beilstein und SciFinder sind aufgrund ihrer Strukturindizes ideale Werkzeuge für Struktursuchen. Ein Annotationssystem für organische Reaktionen namens „Web-Reactions“ (WR) wurde kürzlich an der Brandeis-Universität entwickelt.

Hendrickson und Sander haben chemische Reaktionen anhand der Bindungsumlagerungen während der Reaktion kategorisiert.^[1, 2] Da sich WR fest auf diese Änderungen der Bindungsverhältnisse verlässt, können Suchergebnisse

se wesentlich schneller erzielt werden als in Beilstein, REACCS oder SciFinder. Als ich die Datenbank testete, war ich von der merklich höheren Geschwindigkeit beeindruckt. Zusätzlich ist WR frei zugänglich und erfordert lediglich einen Netscape-Browser. Zusatzmodule werden nicht benötigt, da alles auf Java und CORBA-Protokollen beruht. Das hat allerdings seinen Preis: Weder im Internet Explorer noch im Macintosh OS sind diese Standards ausreichend implementiert, sodass man an die Netscape-Windows-Kombination gebunden ist.

WR ist eine Neuauflage von Info-Chems ChemReact-Datenbank und enthält 401671 verschiedene Reaktionen aus der Primärliteratur von 1975–1991. Im Vergleich zu anderen Datenbanken ist dies eine starke Einschränkung.

WR ist leicht zu erlernen und zu benutzen. Die Site hat eine gute, intuitiv zu benutzende Oberfläche ähnlich ChemDraw (Abbildung 1). Fünf Knöpfe am oberen Rand führen den Nutzer durch den Suchprozess. Als Beispiel versuchte ich, Informationen über Stille-Kupplungen zu erhalten. Ich gab unter „Define Reactants“ ein allgemeines Halogenbenzol und Trimethylvinylzinn ein. Unter „Define Products“ erschien die Eduktzeichnung wieder und ich musste sie lediglich modifizieren. Klicken auf „Search Database“ ergab praktisch umgehend neun Treffern in einem Menü. Einer der Hauptvorteile von WR ist der Straffungsmechanismus, der es erlaubt, nur eine handhabbare Zahl von Ergebnissen (10–20 Reaktionen) zu

erhalten. Um die Ergebnisliste zu verfeinern, kann man entweder die minimale Ausbeute ändern, oder zusätzliche Randbedingungen für Atome und Bindungen angeben. Die Möglichkeiten zum Ändern des Zinnatoms sind sehr zufriedenstellend: Sn; Sn oder Pb; Sn, Pb, Sb oder Bi; B, Si, Ge, Sn, Pb, Sb oder Bi; Gruppe 3A–4A; Gruppe 1A–5A; jedes elektropositive Element oder ein beliebiges. Ich wählte die Gruppe „B, Si, Ge, Sn, Pb, Sb, Bi“ und meine Ergebnisliste verlängerte sich um Suzuki- und Negishi-Kupplungen auf 28 Einträge. Schließlich erhält man durch Druck auf den Knopf mit der Aufschrift „Hit Reactions“ eine Liste mit den entsprechenden Reaktionen.

Schlagen Sie eine Web-Site für diese Rubrik vor:
angewandte@wiley-vch.de

WR ist eine nutzerfreundliche und schnelle Suchmöglichkeit, die frei zugänglich ist. Sie ergänzt existierende Programme wie Beilstein oder SciFinder. Der ökonomische Vorteil liegt aber bei WR. Die Browser- und Betriebssystemprobleme schmälern jedoch den guten Eindruck, insbesondere in einer Macintosh-Umgebung. Obwohl WR nur etwa 400000 Reaktionen aus den Jahren 1975–1991 enthält, ist der Überlapp recht gering und macht WR zu einem wertvollen Werkzeug.

Ulrich Iserloh
Memorial Sloan – Kettering Cancer
Center, New York, NY

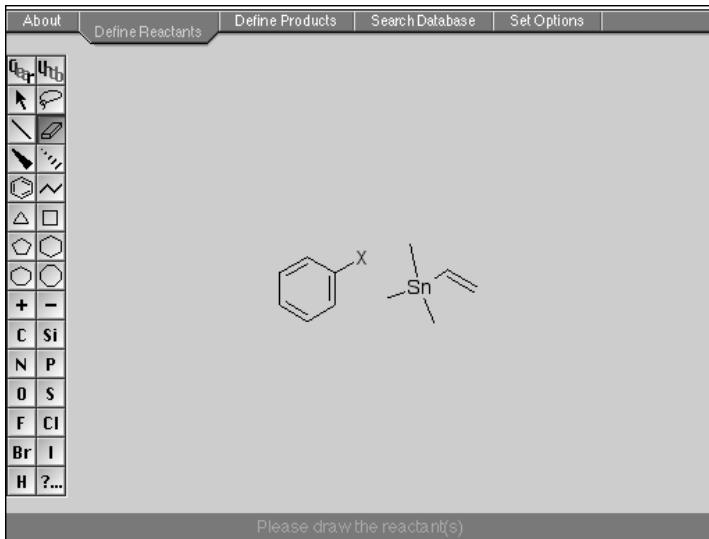


Abbildung 1. Die intuitive Bedienoberflche von Webreactions.

- [1] J. B. Hendrickson, T. L. Sander, *J. Chem. Inf. Comp. Sci.* **1995**, 35, 251; J. B. Hendrickson, T. L. Sander, *Chem. Eur. J.* **1995**, 1, 449. Das COGNOS-Programm zur Reaktionssuche wurde in Webreactions umbenannt und 1995 in seiner jetzigen, Internet-basierten Form gestartet.
 - [2] J. B. Hendrickson, L. j. Zhang, *Chem. Inf. Comp. Sci.* **2000**, 40, 380.

[2] J. B. Hendrickson, L. j. Zhang, *Chem. Inf. Comp. Sci.* **2000**, *40*, 380.

Für weitere Informationen besuchen Sie:
<http://www.webreactions.net/>
oder nehmen Sie Kontakt auf mit
hendrickson@brandeis.edu