



Datenbankrecherche muss nicht teuer sein

Wie sieht das Massenspektrum von 1-Nitro-cyclohexen aus? Wo genau liegen die IR-Absorptionsbanden von Benzaldehyd? Ist mein UV-Spektrum nun das des *ortho*- oder des *meta*-disubstituierten Benzolderivats? Für all diese Fragen musste man noch vor kurzer Zeit die Bibliothek aufsuchen und dicke Spektren-Atlanten durchstöbern. Heute gibt es die Möglichkeit, Datenbanken online zu durchsuchen. Leider bieten die beiden größten und wohl am meisten für organisch-chemische Recherchen genutzten Datenbanken Beilstein und Chemical Abstracts Service (noch?) keine Spektren und auch keine direkte Verknüpfung mit Online-Spektrenbibliotheken. Diese Lücke wird von anderen Anbietern wie Thermo Galactic gefüllt. Deren Online-Datenbank bietet den Zugriff auf 26000 Spektren von Substanzen aus einer breiten Palette von Substanzklassen wie Wirkstoffe, Standardchemikalien, Polymere und viele mehr. Ebenso groß ist die Breite der spektroskopischen Methoden, die

abgedeckt wird: Massenspektrometrie, FT-IR-, Raman-, UV-Vis-, Emissions- und NMR-Spektroskopie.

Der kostenlose Zugriff ist einfach und komfortabel. Nach der Benutzerregistrierung stehen alle angebotenen Funktionen zur Verfügung (Abbildung 1). Neben den zum Standard gehörenden Suchfunktionen nach Summenformel, Substanznamen und -namensfragmenten, CAS-Nummer und Molmasse gibt es eine sehr hilfreiche Methode, um selbst gemessene Spektren mit den Spektren der Datenbank zu vergleichen. Hierfür wird das eigene Spektrum auf den Server übertragen. Viele spezifische Datenformate der Messgeräte-Hersteller oder gängige Exportformate werden unterstützt. Nach erfolgreicher Übertragung wird das Spektrum dem Benutzer zum Überprüfen angezeigt, bevor der Vergleich nach der Auswahl des Suchalgorithmus beginnt. Angezeigt wird eine Trefferliste mit absteigender Übereinstimmung. In dieser Trefferliste klickt man auf eine Substanz und erhält die Auflistung der verfügbaren Spektren (Abbildung 2). Diese Spektren sind als GIF-Datei oder Java-basierte Ansicht mit Zoomfunktion abrufbar. Zusätzlich werden, falls vorhanden, noch weitere Informationen, wie Messdetails oder Datenherkunft ausgegeben.

Die Herkunft der Daten ist vielfältig. Eingebunden in die Datenbank sind die Spektrensammlungen einiger Universitäten wie der Notre Dame oder Pacific Lutheran University und anderer Organisationen wie des US National Institute of Standards and Technology (NIST).^[1] Auch Spektren einzelner Benutzer werden in die Datenbank übernommen. Dafür wird eine eigene Funktion angeboten, mit deren Hilfe Spektren und Zusatzinformationen in das System übertragen werden können. Eine Überarbeitung oder Begutachtung der Daten durch Thermo Galactic findet allerdings nicht statt. Sämtliche Spektren werden direkt aus den Rohdaten übernommen. Daher finden sich auch einige

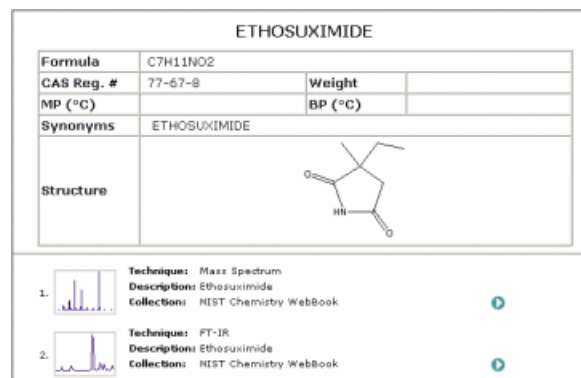


Abbildung 2. Suchergebnis in der Datenbank.

Fehler, wie z.B. eine falsche Strukturformel. Auch andere systembedingte Fehler treten gelegentlich auf, wie z.B. eine zeitweise Nichtverfügbarkeit der Spektren-Links aus den Substanzlisten.

Das Design der Webseite ist sehr ansprechend und übersichtlich und beschränkt sich auf die wesentlichen Funktionen. Auf überflüssige Werbung und Pop-Up-Fenster wurde dankenswerterweise verzichtet. Nur wenige sehr kleine und dezente Werbelinks sind untergebracht.

Bei kritischer Verwendung der angebotenen Daten ist die Internetseite für die zeitsparende Web-Recherche von Spektren sehr nützlich. Sowohl für Forscher, die schnell das Vergleichsspektrum eines postulierten Nebenprodukts suchen, als auch für Lehrende und Studierende im Rahmen der Ausbildung zur spektroskopischen Analyse organischer Substanzen ist die Datenbank hervorragend geeignet. Und zusammen mit anderen web-basierten Datenbanken (wie z.B. der SDBS^[2] mit über 30000 Substanzen und einer umfangreicheren NMR-Sammlung) sind kostenlose Datenbank-Recherchen inzwischen auch hinreichend umfassend.

Christoph Bonauer, Burkhard König
Universität Regensburg



Abbildung 1. Erst nach Registrierung stehen die Funktionen der Thermo-Galactic-Datenbank voll zur Verfügung.

- [1] D. Schröder, *Angew. Chem.* **2001**, *113*, 4647; *Angew. Chem. Int. Ed.* **2001**, *40*, 4515.
- [2] <http://www.aist.go.jp/RIODB/SDBS/menu-e.html>.

Für weitere Informationen besuchen Sie:
<http://spectra.galactic.com/>
oder nehmen Sie Kontakt auf mit:
science@galactic.com