

Documentatio

Institut für physikalische Chemie der Universität Göttingen,
Lehrstuhl für theoretische Chemie,
Institut für physikalische Chemie der Universität Frankfurt am Main und
Naturwissenschaftliche Fakultät der Universität Frankfurt am Main

Über eine Randlochkartei zur Dokumentation der Quantentheoretischen Chemie (DQC)

Von

W. A. BINGEL, G. DIERCKSEN* und H. PREUSS**

A punch card index for documentation of Quantum Chemistry.

Une documentation de la chimie quantique à l'aide des cartes perforées.

I. Einleitung

In der vorliegenden Arbeit wird ein Verfahren zur Dokumentation der Quantentheoretischen Chemie (DQC) auf Randlochkarten beschrieben. Hiermit soll eine Möglichkeit zur schnellen und sicheren Information über die Literatur auf diesem Gebiet geschaffen werden. Abgesehen davon, daß die Sichtung der älteren und laufenden Literatur bei der heutigen Zahl der jährlichen Publikationen für einen Einzelnen nicht mehr möglich ist, stellt sie eine unverantwortliche Zeitverschwendung hochspezialisierter Fachkräfte dar. Dies ist um so mehr der Fall, als die Beantwortung der meisten Fragen bei Vorliegen einer entsprechenden Kartei, in der alle betreffenden Arbeiten erfaßt und sinnvoll verschlüsselt sind, weitgehend durch eine Vorsortierung zu erreichen ist, die von Hilfskräften mit gut entwickelten Sortiergeräten durchgeführt werden kann. Daher besteht das Hauptproblem in der Verschlüsselung der Quantentheoretischen Chemie. Es sei bereits an dieser Stelle darauf hingewiesen, daß ein solcher Schlüssel immer vielfältiger Kritik ausgesetzt sein wird. Das liegt vor allem darin begründet, daß jeder Wissenschaftler eine ganz persönliche Einstellung zu seinem Fachgebiet hat und naturgemäß den Teil stärker in den Vordergrund gestellt und aufgegliedert haben möchte, an dem er selbst besonders interessiert ist und auf dem er arbeitet. Nun erhöht aber ein zu weit in das einzelne gehender Schlüssel nicht nur die Kosten beträchtlich, sondern erschwert nach unseren Erfahrungen die Einordnung der Arbeiten ganz wesentlich und macht das Verfahren schwerfällig. Der im folgenden zu beschreibende Schlüssel stellt eine Kompromißlösung in diesem Sinne dar, wie es nach dem gesagten immer der Fall sein muß. Allerdings soll nicht unerwähnt

* Anschrift: Sub-Department of Theoretical Physics and Chemistry, University of Keele, England.

** Anschrift: Max Planck-Institut für Physik und Astrophysik, München, Föhringer Ring 6.

gelassen werden, daß dem Schlüssel ein älterer Entwurf (H. PREUSS; 1954) und die Sachregister zweier umfangreicher Literaturkarteien (W. A. BINGEL, H. PREUSS) zugrunde liegen. Darüber hinaus hat sich bei zahlreichen Stichproben an älteren Arbeiten und der laufenden Erfassung der entsprechenden Literatur seit dem 1. 1. 1964 durch die Autoren bisher kein Mangel des Schlüssels gezeigt. Wir dürfen daher mit gutem Grund annehmen, eine brauchbare Lösung gefunden zu haben.

Für die vorliegende Dokumentation ist auf die Randlochkarte zurückgegriffen worden. Diese Wahl liegt im besonderen darin begründet, daß die Randlochkarte gegenüber anderen Dokumentationsarten, wie z. B. der Flächenlochkarte oder etwa elektronischen Datenverarbeitungsmaschinen den Vorzug hat, daß sie alle Informationen gleichzeitig im Klartext enthält. Dies ist von größter Bedeutung, wenn sich am Aufbau der Kartei mehrere Mitarbeiter beteiligen, wie es bei dem Umfang der anfallenden Literatur unumgänglich ist. Die so erstellten Karteikarten bilden darüber hinaus die Grundlage jeder höher automatisierten Form der Dokumentation und lassen sich nach dem Xerox- oder einem anderen geeigneten Verfahren leicht duplizieren, was von Bedeutung ist, so lange keine andere Vervielfältigung erfolgt.

Das Schwergewicht der Arbeit liegt vorerst in der Verfolgung, Erfassung und Verschlüsselung der laufend veröffentlichten Literatur. Dabei ist Sorge getragen, daß die Überwachung vollständig ist. Erst an zweiter Stelle folgt zunächst die Aufarbeitung der älteren Literatur. Hierfür stehen zwei umfangreiche Sachkarteien (W. A. BINGEL, H. PREUSS) als Hilfe zur Verfügung, die jedoch im wesentlichen nur als Zitatsammlungen von Wert sind.

II. Die Dokumentation

Die Dokumentation soll alle Arbeiten der quantentheoretischen Chemie, die sich mit den physikalischen bzw. chemischen Eigenschaften der Atome und Moleküle sowie mit den chemischen Reaktionen beschäftigen, umfassen. Veröffentlichungen über Festkörperphysik sowie Kern- und Elektronenspinresonanz werden nicht berücksichtigt.

Das Dokumentationsverfahren soll bei der Auswertung auf folgende Fragen Antwort geben:

- a) Welche Arbeiten sind von einem bestimmten Autor bzw. in einem bestimmten Jahr erschienen ?
- b) Welche Arbeiten behandeln oder verwenden ein bestimmtes Verfahren ?
- c) Welche Rechnungen und Untersuchungen liegen über bestimmte Atome, Moleküle oder Gruppen davon vor und
- d) welche über bestimmte Eigenschaften ?

Hierzu wird für jede in Frage kommende Arbeit eine Karteikarte angelegt. Wir glauben nun, ein Dokumentationssystem vorlegen zu können, dessen Schlüssel es gestattet, diese Fragen weitgehend durch eine mechanische Vorsortierung zu beantworten.

III. Die Kartei

Die Karteikarten sind einheitlich chamois und an der rechten oberen Ecke abgeschragt. Im Karteninneren finden sich die bibliographischen Angaben: Verfasser, Überschrift, Quellenangabe und ein Referat. Der Kartenrand enthält auf

jeder Seite zwei Lochreihen. Durch einen aufgedruckten Schlüssel wird jedem Loch ein Merkmal zugeordnet. Es werden gekennzeichnet:

a) Der Verfasser* und das Erscheinungsjahr am rechten, die Publikationsart am linken Rand.

b) Das behandelte bzw. verwendete Verfahren am linken und unteren Rand.

c) Die untersuchten Systeme sowie die sie aufbauenden Atomarten am linken bzw. oberen Rand und die untersuchten Eigenschaften desgl. am unteren Rand.

Tritt ein Merkmal auf, so wird das zugehörige Schlüsselfeld markiert und das entsprechende Loch gekerbt. In jedem Lochpaar ergeben sich dabei drei Kennzeichnungsmöglichkeiten:

a) Nur das äußere Loch wird zum Rand hin aufgeschnitten: *flach*-Kerbung.

b) Das ganze Lochpaar wird zum Rand hin aufgeschnitten: *tief*-Kerbung.

c) Lediglich der Steg zwischen den beiden Löchern wird aufgeschnitten: *mittel*-Kerbung.

Die Sortierung kann von Hand oder mit einem entsprechenden Gerät erfolgen. Man führt Sortiernadeln durch alle die Löcher eines Kartenstapels, die die gesuchten Merkmale tragen. Beim Schütteln fallen dann die Karten heraus, die an den befragten Stellen gekerbt sind, d. h. die gesuchten Merkmale besitzen.

IIIa) Bibliographische Angaben und Referat

Die *bibliographischen Angaben* werden aufgeführt in der Reihenfolge: Verfasser, Überschrift und Quellenangabe und abgefaßt in einer der Sprachen: Deutsch, Englisch oder Französisch. Sie werden zusammengestellt nach dem Original, wenn dies in einer der angegebenen Sprachen erschienen ist, anderenfalls nach dessen Übersetzung in eine dieser Sprachen und nur dann nach einem Referatorgan, wenn entweder das Original schwer zugänglich ist bzw. die erforderliche Übersetzung nicht vorliegt oder gleichfalls schwer zugänglich ist. Wurde die Arbeit nicht in deutsch, englisch oder französisch veröffentlicht, so wird die Publikationssprache in Klammern hinter der Überschrift vermerkt und gegebenenfalls die Übersetzung gleichfalls in Klammern hinter der Quellenangabe des Originals zitiert. Angaben nach einem Referatorgan werden als solche gekennzeichnet durch dessen in Klammern gesetztes Zitat hinter der Quellenangabe. Alle Zeitschriften werden abgekürzt nach der „Chemical List of Periodicals 1961, and Suppl. 1962“.

Das *Referat* wird gleichfalls abgefaßt in einer der Sprachen: Deutsch, Englisch oder Französisch.

IIIb) Schlüssel und Verschlüsselung

Von den *Verfassern* werden die 2 Anfangsbuchstaben des 1. Autors eindeutig gekennzeichnet. Dazu werden zwei 6- bzw. 5-stellige Dreieckschlüssel verwendet (Fig. 1).

Jeder Buchstabe wird durch eine Zweier-Kombination gekennzeichnet. Diese ergibt sich bei Verlängerung der Buchstabenfelder zum Lochrand. Steht der Buchstabe auf der rechten Seite des Feldes, so ist das rechte Lochpaar *flach* zu kerben,

* Bei mehreren Verfassern kann für jeden Autor eine Randlochkarte angefertigt werden, bei der *dieser* Verfasser gekennzeichnet wird und alle anderen Eintragungen die gleichen sind.

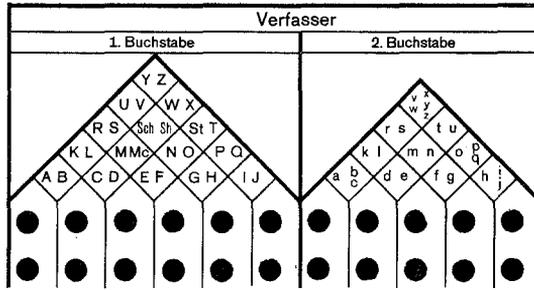


Fig. 1

Erscheinungsjahr							
19 . .							
Zehner				Einer			
1	2	4	7	1	2	4	7
●	●	●	●	●	●	●	●
●	●	●	●	●	●	●	●

Fig. 2

● ●	Empirische- (Experimentelle-)		Verfahren (Allgemeine)
● ●	Halb-empirische-		
● ●	Halb-theoretische-		
● ●	Theoretische, (Wellenmechanische)	Theoretische, (Klassische)	
● ●	Phänomenologische-	Statistische-	

Fig. 4a

● ●	1-	>1-	Elektronen-	Funktionen
● ●	Exp.	Gauß	-	
● ●	1-	2-	Zentren-	
● ●	Dichte-			

Fig. 5a

● ●	1-	2-	Elektronen-	Integrale
● ●	1-	2-	Zentren-	
● ●	3-	4-		

Fig. 5b

● ●	Originalarbeiten	Publikationsart
● ●	Übersichtsartikel	
● ●	Lehrbücher	
● ●	Tabellen	

Fig. 3

● ●	Determinantenentwicklung	Cl- (Termmischung)	Verfahren (Spezielle)
● ●	SCF-	Analyt. SCF-	
● ●	AP	ASMO-	
● ●	LCAO-	HMO-	
● ●	MO-	LCMO-	
● ●	HLSP- (VB-)	HLSP- (VB-) + Ionale Struktur.	
● ●	"Semilocalized Orbitals"	LCBO-	
● ●	FE-	FE- + Elektronenwechselwirkung -	
● ●	WKB-		
● ●	Heitler-Rumer-		
● ●	Vektormodell		
● ●	- der Atome in Molekülen	- der getrennten Atome	
● ●	1-Zentrum Entwicklung	- des vereinigten Atoms	
● ●	- der Moleküle in Molekülen	- der Atomassoziationen	
● ●	R-Entwicklung	Z-Entwicklung	
● ●	Störungsrechnung	Störungsrechnung 1. Ordnung	
● ●	Zeitabhängige Störungsrechnung		
● ●	Variations-	"Scaling" [Virialsatz]	
● ●	Statistische Theorie	Komb. Näherungs- (Eff. Potential)	
● ●	"Transition State"		
● ●	Sonstige-		

Fig. 4b

● ●	Anorganische Verbindungen	Komplexe	Systeme
● ●	Organische Verbindungen	Komplexe, Metallorg.-Verb.	
● ●	Ketten		
● ●	Ringe	Heteroringe	
● ●	Gesättigte Verbindungen		
● ●	Ungesättigte Verbindungen		
● ●	1- 5-	atomiges Molekül	
● ●	2- 6-		
● ●	3- 7-		
● ●	4- 8-		

Fig. 6a

Eigenschaften und Verhalten	Bindungsabstände	Geometrische Struktur	● ●
	Potentialkurven	Energiehyperflächen	● ●
	Aktivierungsenergien	Bildungswärmen (Bindungsenergien)	● ●
	Reaktionsraten	Reaktionsvorgänge	● ●
	Multipolübergänge	Matrixübergangselemente	● ●
	Ionisationsenergie (Affinität)	Energieterme	● ●
	Sichtbare Spektren	Elektronenspektren	● ●
	Allg. Potentialkonstanten (Kraftkonstanten)	Molekülschwingungen, Rotation (UR)	● ●
Ladungsübertragung	Streuung	● ●	
	Erwartungswerte (außer Energie-)	● ●	

Fig. 7a

Elemente	H					● ●	
	He	Ne	Ar	Kr	X	Rn	● ●
	Li	Na	K	Rb	Cs	Fr	● ●
	Be	Mg	Ca	Sr	Ba	Ra	● ●
	B	Al	Ga	In	Tl		● ●
	C	Si	Ge	Sn	Pb		● ●
	N	P	As	Sb	Bi		● ●
	O	S	Se	Te	Po		● ●
	F	Cl	Br	J	At		● ●
	Sc	Y	(La) (Ac)	Ti	Zr	Hf	● ●
	V	Nb	Ta	Cr	Mo	W	● ●
	Mn	Tc	Re	Fe	Co	Ni	● ●
	Ru	Rh	Pd	Os	Ir	Pt	● ●
	Cu	Ag	Au	Zn	Cd	Hg	● ●

Fig. 6b

Allgemeine Bindungsfragen	Ladungsordnung, Bindungsordnung	Populationsanalyse	● ●
	Hybridisierung	Valenzzustände	● ●
	Wasserstoffbrückenbindung	Zwischenmolekulare Kräfte	● ●
		Relativistische Effekte	● ●

Fig. 7b

das linke dagegen *tief*, steht der Buchstabe dagegen links, so gilt entsprechend das umgekehrte.

Vom *Erscheinungsjahr* werden die letzten 2 Ziffern eindeutig gekennzeichnet. Hierzu werden zwei 1-2-4-7-Schlüssel benutzt (Fig. 2).

Die verschiedenen Ziffern sind durch folgende *Kerbungen* festgelegt (Tab. 1):

Tabelle 1

1: 1	<i>tief</i> -Kerbung
2: 2	<i>tief</i> - „
3: 2 + 1	<i>flach</i> - „
4: 4	<i>tief</i> - „
5: 4 + 1	<i>flach</i> - „
6: 4 + 2	<i>flach</i> - „
7: 7	<i>tief</i> - „
8: 7 + 1	<i>flach</i> - „
9: 7 + 2	<i>flach</i> - „
0: 7 + 4	<i>flach</i> - „

(nach Definition)

Die *Publikationsarten* sind unterteilt nach Fig. 3.

In diesen und in allen anderen Fällen, in denen einem Merkmal ein ganzes Lochpaar zugeordnet ist, lautet die Kerbungsvorschrift (1): Beim Auftreten eines Merkmals ist das entsprechende Lochpaar *flach* zu kerben.

Die *Verfahren* sind sehr fein gegliedert (Fig. 4a u. 4b).

Der Schlüssel ist so aufgebaut, daß das in der *äußeren* (randnäheren) Spalte stehende Merkmal jeweils das in der *inneren* Spalte stehende einschließt. Für diesen Schlüssel erweist sich folgende Kerbungsvorschrift (2) als zweckmäßig: Zur Kennzeichnung eines *außen* stehenden Merkmals ist das entsprechende Lochpaar *flach* zu kerben, zu der eines *innen* stehenden dagegen *tief*. Fragt man nun nach einem *außen* stehenden Merkmal, so werden die entsprechenden Karten durch *flaches* Einstechen der Nadeln, d. h. in das *äußere* Loch, aussortiert. Auch alle Karten, bei denen das *innere* Merkmal gekennzeichnet ist, fallen hierbei — folgerichtig — mit. Fragt man dagegen speziell nach einem *inneren* Merkmal, so werden die zugehörigen Karten durch *tiefes* Einstechen ausgesondert.

Einige der auftretenden Merkmale seien durch folgende *Definitionen* festgelegt: Unter halbempirischen Verfahren sollen solche Arbeiten verschlüsselt werden, in denen an Hand einer großen Anzahl von experimentellen Ergebnissen gewisse Gemeinsamkeiten und Regeln aufgestellt und diese dann mathematisch formuliert werden. Unter halbtheoretischen Verfahren werden dagegen solche gekennzeichnet, in denen im Rahmen theoretischer Behandlung einige der wesentlich auftretenden Ausdrücke empirisch festgelegt werden, um daraus andere Moleküleigenschaften zu bestimmen [1].

Sofern in Arbeiten bestimmte *Funktionen* verwendet oder *Integrale* berechnet bzw. abgeschätzt sind, werden auch diese verschlüsselt (Fig. 5a u. 5b).

Für die bei den Elektronen- und Zentrenangaben auftretenden Zahlen wird folgende Kerbungsvorschrift (3) eingeführt: Das *außen* stehende Merkmal ist wieder durch *flache* Kerbung zu kennzeichnen, das *innen* stehende dagegen durch *mittel* Kerbung und beide gleichzeitig — folgerichtig — durch *tiefe* Kerbung. Diese Vorschrift ermöglicht nun, alle zu einem Merkmal gehörigen Karten eindeutig auszusortieren. Sucht man nach dem *äußeren* Merkmal, so werden die entsprechenden Karten durch *flaches* Einstechen abgetrennt. Sucht man dagegen nach einem *inneren* Merkmal, so gestaltet sich die Auswahl etwas umständlicher. Man sticht dazu *tief* ein; dann fällt ein Teil der gesuchten Karten bereits aus, der andere rutscht ein Loch tiefer. Blockiert man die zurückgebliebenen Karten durch zwei in die Ecklöcher eingeführte *Haltenadeln* und entfernt die Sortiernadeln, so fallen die restlichen gesuchten Karten.

Auch die nach einzelnen Verfahren behandelten Atome und Verbindungen lassen sich mit Hilfe der entsprechenden *Systeme* und *Elemente* weitgehend kennzeichnen (Fig. 6a u. 6b).

Die Systeme, außer der Atomzahl, werden hierbei nach Kerbungsvorschrift (2) gekerbt, die Elemente, einschließlich der Atomzahl*, dagegen nach Kerbungsvorschrift (3).

Die *Eigenschaften* und das *Verhalten* sowie die *allgemeinen Bindungsfragen* sind, analog den Verfahren, folgendermaßen unterteilt (Fig. 7a u. 7b).

In beiden Fällen wird die Kerbungsvorschrift (2) angewandt.

* Dabei gilt die Kerbung für 8 Atome sinngemäß für 8 und mehr Atome.

Zum besseren Verständnis soll das beschriebene Verfahren zur Registrierung und Verschlüsselung noch an einem Beispiel demonstriert werden (Fig. 8a u. 8b).

Mit dem vorgeschlagenen Schlüssel erreicht man bereits ein sehr feinmaschiges Netz und kann weitgehend mechanisch vorsortieren, sowohl bei schwieriger Fragestellung wie auch bei großen Karteien. Dabei läßt sich der Sortieraufwand in weiten Grenzen variieren.

Diese Randlochkartei läßt sich leicht durch eine Sichtlochkartei ergänzen. Doch sollte die Frage erst diskutiert werden, wenn sich eine Notwendigkeit dafür ergibt.

Wir danken Herrn Prof. Dr. H. HARTMANN für das Interesse an dieser Arbeit und die Förderung der Untersuchungen. Einer von uns (G. D.) dankt ferner der Deutschen Forschungsgemeinschaft für ein Stipendium.

Literatur

[1] PREUSS, H.: Quantentheoretische Chemie I, S. 17. Mannheim: Bibliographisches Institut A. G. 1963

(Eingegangen am 20. Mai/7. Dezember 1964)