BERICHTE

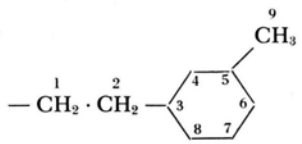
Zur Frage der Chiffrierung der organischen Verbindungen

Bemerkungen zu dem Chiffrierungs-System von W. Gruber [1, 2]

Von FRIEDRICH RICHTER*

(Z. Naturforschg. 6b, 400—401 [1951]; eingegangen am 15. Mai 1951)

Es ist eine allgemeine Erfahrung, daß mit wachsender Zahl und Kompliziertheit der organischen Verbindungen die rasche Orientierung in den Registern der Referatenorgane und Sammelwerke zunehmend erschwert wird. Bei dem gegenwärtigen Stand der Registertechnik beruht dies in erster Linie darauf, daß in den Formelregistern die Zahl der Isomeren zunimmt, zwischen denen eine Auswahl zu treffen ist, sodann auf den bekannten Schwierigkeiten der Nomenklatur. Man begreift daher das Interesse, das der originelle Versuch von G. M. Dyson (1947) gefunden hat, eine einzeilige, abgekürzte, aber eindeutige Notation der Strukturformel in Buchstaben und Zahlen zu schaffen, die das rasche Wiedererkennen der Struktur ohne das Vehikel des Namens ermöglichen soll und gleichzeitig Gelegenheit zu registermäßiger Ordnung und maschineller Sortierung bietet. Die Anfangsresultate schienen die Möglichkeit der Durchführung zu erweisen und gaben damit den Ansporn zur Fortsetzung der Versuche. Dyson selbst hat in einer 2. Auflage seiner Monographie (1949) in glänzender Diktion ein immer noch nicht erschöpfendes, aber doch schon ziemlich detailliertes Regelwerk ausgearbeitet, nach dem solche „Chiffren" zu bilden wären. W. Gruber, dem das Dyson-System zu kompliziert erschien, veröffentlichte ebenfalls 1949 ein Chiffrierungs-System [1], das bei Übernahme vieler Grundgedanken Dysons in der Durchführung doch recht erheblich abweicht und den Anspruch auf größere Einfachheit erhebt. Äußerlich fällt dabei zunächst der Ersatz der bei Dyson häufig nur mechanisch zu erlernenden Funktions-Symbole durch das Teilformelbild ins Auge: z. B. Doppelbindungs-Symbol = (Dyson: E), Azo N=N (N4), Oxo =O (EQ), Carboxyl =OOH (X), Oxim =NOH (ENQ) usw. Der wesentliche Unterschied liegt jedoch in den Grundsätzen, nach denen der Ausgangspunkt der Registrierung, sozusagen das Fundament der Chiffre, von Gruber „Stamm", von Dyson „generating operation" genannt, ermittelt wird. Neu ist bei Gruber namentlich die Übertragung des Kettenbegriffs auf Äther, Ester, Amine usw. („Z-Ketten"). So wird Diäthyläther als 5gliedrige Z-Kette Z5[C2 O C2] chiffriert (Dyson $[C_2]_2Q$). Gemischte aliphatisch-cyclische Seitenketten werden als „RA-Ketten" (unter Addition der gesamten C-Zahl) zusammengefaßt und durchnumeriert,



z. B. wird *m*-tolyl-äthyl nach obenstehendem Bezifferungsschema als RA9[C2Ph(5)C] symbolisiert. Ein Vergleich der Chiffren des *N.N'*-Di-[*β*-anthrachinonyl]-äthylendiamins nach Gruber III6.7,14=O.3RZ18[NC2N(7)UIII6.11,18=O] und nach Dyson C_2.N[$B6_3$,1,4.H,3,6.EQ,3,6],1,2 zeigt auch dem Neuling die Verschiedenheit der Verfahren, Ableitung vom Anthrachinon mit einer „Seitenkette" von 18 Atomen bei Gruber, vom Äthan bei Dyson. Auf weitere Einzelheiten einzugehen ist hier nicht der Platz. Auch der nur skizzierte Gedanke beider Autoren, durch Rückübertragung der Chiffre eine neue Registernomenklatur zu schaffen, sei lediglich im Vorübergehen am Beispiel des Indens (Gruber: Pen-sexin, Dyson: Hexapentalen) und Tetraphenylmethans (G.: Sexin-methan-diphenylsexin, D.: Tetrakisphenylmethan) illustriert. Im ganzen genommen ist Grubers nur als erster Entwurf gedachtes System noch zu kurz, Präsentation und Fassung der Regeln [3] nicht immer derart, daß man die Auswirkungen völlig zu übersehen vermag. Daß die Zielsetzung des Autors ursprünglich nur der Nomenklatur galt, ist gelegentlich noch spürbar. Für ein abschließendes Urteil wird eine ausführlichere Ausarbeitung nicht zu entbehren sein, für die man sich auch eine klärende direkte Auseinandersetzung mit dem Dyson-System wünschen würde. Der Rezensent betrachtet es als einen Vorzug des Dyson-Systems, daß es bei der Aufgliederung der Strukturformeln mehr dem gewohnten chemischen Denken folgt und daß seine Chiffren trotz der neuartigen Symbole oft übersichtlicher sind. Doch muß man sich bewußt bleiben, daß bisher weder in der Symbolik noch in der Art der Aufgliederung (d. h. Systematik) irgendwie Endgültiges erreicht ist und daß dies ohne eine eingehende Diskussion *aller* Aspekte des Chiffrierungs-Problems auch gar nicht möglich ist.

Es scheint deshalb angebracht, den Voraussetzungen und Möglichkeiten solcher Systeme noch einige allgemeine Worte zu widmen, da das Publikum hierüber erfahrungs-

* Beilstein-Institut, Frankfurt a. M.-Höchst.

[1] W. Gruber, Angew. Chem. **61**, 429 [1949].
Die Genfer Nomenklatur in Chiffren und Vorschläge für ihre Erweiterung auf Ringverbindungen. Ein neues Ordnungssystem für organische Verbindungen. Von W. Gruber, Beihefte zu „Angewandte Chemie" und „Chemie-Ingenieur-Technik". Nr. 58. 72 Seiten. Verlag Chemie Weinheim/Bergstr. 1950.

[2] Anm. b. d. Korrektur: Seit der Niederschrift dieser Besprechung sind dem Verf. eine Reihe weiterer Chiffrierungs-Systeme teilweise recht abweichender Natur bekannt geworden, die demnächst in einem zusammenfassenden Bericht behandelt werden sollen. Die hier vorgetragenen allgemeinen Schlußfolgerungen werden dadurch nicht berührt.

[3] Inzwischen überarbeitet.

gemäß nur höchst nebelhafte Vorstellungen hat und die Freude am Neuen vielfach die Frage nach Sinn und Zweck in den Hintergrund drängt. Alle Chiffrierungs-Systeme haben die Existenz eines umfassenden, eindeutigen Bezifferungssystems oder eines äquivalenten Ordnungssystems zur Grundvoraussetzung. Ein solches existierte bisher nicht. Wenn die Chiffrierungs-Systeme nunmehr im Prinzip eine Lösung dieser Aufgabe präsentieren, so ist der Preis für das scheinbare Wunder: Bruch mit vielen, wenn nicht den meisten Traditionen der Vergangenheit und Inkaufnahme eines schon im Entwurf recht komplizierten Regelwerks, das bei jedem System ein anderes ist und vom Bereich der Tautomerie her noch zusätzliche Belastungen erfahren wird. Nun pflegt der Chemiker für die Benutzung der Register wenig mehr als die Kenntnis des Alphabets und der Rudimente der traditionellen Nomenklatur mitzubringen, keineswegs dagegen Vertrautheit mit der Bezifferung oder Systematik. Von hier den weiten Schritt zur Einheitsbezifferung der Chiffrierungs-Systeme unternehmen zu wollen, ist vermutlich ein hoffnungsloses Beginnen. Es ist recht unwahrscheinlich, daß der gewöhnliche Leser eine Chiffre nach den Regeln eindeutig und fehlerfrei zu konstruieren lernt, er wird daher seine Verbindung in den Chiffre-Registern auch nicht finden können. Selbst für den geübten Fachmann muß es die Übersicht erschweren, daß allzuviele kompliziertere Chiffren nur unter Zuflucht zu Bleistift und Papier entziffert werden können. Fertigkeit im Umgang mit der traditionellen Nomenklatur und Bezifferung wird in irgendeiner Form auch in Zukunft nicht entbehrt werden können. Man muß sich das Maß dieser Belastungen klar machen, um zu erkennen, daß die Einführung von Chiffren für Register des alltäglichen Gebrauchs nicht sehr vielversprechend ist. Auf die unverhältnismäßig gesteigerten Gefahren von Druckfehlern braucht kaum hingewiesen zu werden.

Bedeutungsvoller für den selbständigen Wert der Chiffrierungs-Systeme wäre es schon, wenn eine rein „alphabetische" Anordnung der Chiffren ganz automatisch eine ausreichende systematische Ordnung ergeben würde, so daß man auf andere Systematik verzichten könnte. Doch wird man wohl auch bei geeigneter Wahl der Symbolik bestenfalls immer nur „Inseln" der Systematik innerhalb einer unergiebigen Umgebung erhalten können. Die sinnlose Automatik des Alphabets und der Zahlenfolge arbeitet dem Fluß des systematischen Prinzips eben häufig entgegen. Allzugroße Hoffnungen wird man deshalb an diesen Aspekt nicht knüpfen können. Der gleichen Ansicht scheint auch Dyson zu sein, wenn er von der alphabetischen Anordnung der Chiffren sagt, sie sei keineswegs zwangsläufig systematisch, es sei aber wünschenswert, wenn sie dies wenigstens annähernd leiste. Umgekehrt dürfte eine besondere Systematik zur Anordnung der Chiffren, wie sie namentlich von Gruber empfohlen wird, vom Standpunkt der Chiffrierungs-Systeme wohl eher als eine Belastung empfunden werden.

So bliebe denn als unbestrittene Domäne der Chiffrierung die mechanische Ordnung bzw. Aussortierung, z. B. aller Pyrrole, Fluorverbindungen usw., mit Hilfe der Lochkarten-Verfahren. Naturgemäß erhält man hierbei nicht mehr als in die Symbole hineingesteckt wurde, und dies ist bei dem Mangel an echten algebraischen Beziehungen zwischen den Teilen der Chiffre nicht soviel wie man erwarten würde. Es ist deshalb wohl noch offen, ob ein einziges System allen Ansprüchen zu genügen vermag, die für Literatursammlung oder Korrelationsstudien (z. B. Zusammenhang zwischen Struktur und biologischen Eigenschaften) in Frage kommen und ob nicht das System durch „Vorbereitung" dem besonderen Zweck jeweils angepaßt werden muß. Die Art der lösbaren Probleme wird natürlich auch von den verfügbaren Maschinentypen beeinflußt. Auf die Richtung, in der sich die Chiffrierung entwickeln wird, werden die erheblichen Kosten der Ausarbeitung und Durchführung nicht ohne Einfluß sein.

Die Diskussion über die durch die Chiffrierung eröffneten Möglichkeiten wird vermutlich nicht mehr abreißen, weil man gewisse Ordnungsprobleme nur mit ihrer Hilfe angreifen kann. Man steht jedoch hier erst am Anfang einer Arbeit, die umfassende und vielseitige Kenntnisse erfordert und für die deshalb nur ein kleiner Kreis von Fachleuten berufen ist. Zahlreiche Grundfragen wie die der Tautomerie und Mesomerie, der stereochemischen Notation, der sauberen Wiedergabe der Bindungstypen (homöopolar und heteropolar) sind bisher kaum gestreift. Ein Endergebnis, das von Dauer sein soll, darüber täusche man sich nicht, wird keineswegs einfach sein. Nach allem dürfte also klar sein, daß die Chiffrierungs-Systeme keine „Wunderwaffe", kein Arkanum für alle Leiden darstellen, sondern vorerst nur ein zusätzliches Hilfsmittel in der Hand von Spezialisten sein können, obwohl man ihnen im Interesse der Standardisierung eine weitere Verbreitung wünschen würde. Sie entheben uns nicht der Mühe, auch weiterhin nach selbständigen, dem chemischen Denken gemäßen Wegen zur Verbesserung unserer Nomenklatur und Bezifferung, auch im Hinblick auf die Registrierung, zu suchen. Durch die Verwandtschaft der Probleme geht auch in dieser Hinsicht von den neuen Systemen eine anregende Wirkung aus, die uns Anlaß ist, den Erfindern für ihre mühevolle Arbeit zu danken.

BESPRECHUNGEN

Anorganische Chemie. Von Karl A. Hofmann. 14. Aufl., völlig neu bearbeitet und erweitert von Ulrich Hofmann und Walter Rüdorff. Verlag Friedr. Vieweg & Sohn, Braunschweig 1951. 864 S. mit 116 Abb.; Preis geb. DM 25.—.

Es wird heute oft von einer Krise der Wissenschaft gesprochen. Diese Krise ist aber vielleicht eher als eine „Krise der Lehrbücher" zu bezeichnen. Die ungeheure Zunahme des Wissens in den letzten Jahrzehnten, sowohl in bezug auf die experimentellen Tatsachen, als auch die Theorien, die diese Tatsachen überblickbar machen sollen, und die tiefgreifende Verflechtung einer Wissenschaft mit ihren Nachbarwissenschaften, stellen den modernen Autor eines Lehrbuches vor eine Fülle von sich wider-