

Zeitschrift: Berichte der St. Gallischen Naturwissenschaftlichen Gesellschaft
Herausgeber: St. Gallische Naturwissenschaftliche Gesellschaft
Band: 87 (1994)

Artikel: flukalog : Chemie zur Sprache gebracht
Autor: Schwartz, Ulrich
DOI: <https://doi.org/10.5169/seals-832721>

Nutzungsbedingungen

Die ETH-Bibliothek ist die Anbieterin der digitalisierten Zeitschriften auf E-Periodica. Sie besitzt keine Urheberrechte an den Zeitschriften und ist nicht verantwortlich für deren Inhalte. Die Rechte liegen in der Regel bei den Herausgebern beziehungsweise den externen Rechteinhabern. Das Veröffentlichen von Bildern in Print- und Online-Publikationen sowie auf Social Media-Kanälen oder Webseiten ist nur mit vorheriger Genehmigung der Rechteinhaber erlaubt. [Mehr erfahren](#)

Conditions d'utilisation

L'ETH Library est le fournisseur des revues numérisées. Elle ne détient aucun droit d'auteur sur les revues et n'est pas responsable de leur contenu. En règle générale, les droits sont détenus par les éditeurs ou les détenteurs de droits externes. La reproduction d'images dans des publications imprimées ou en ligne ainsi que sur des canaux de médias sociaux ou des sites web n'est autorisée qu'avec l'accord préalable des détenteurs des droits. [En savoir plus](#)

Terms of use

The ETH Library is the provider of the digitised journals. It does not own any copyrights to the journals and is not responsible for their content. The rights usually lie with the publishers or the external rights holders. Publishing images in print and online publications, as well as on social media channels or websites, is only permitted with the prior consent of the rights holders. [Find out more](#)

Download PDF: 30.12.2025

ETH-Bibliothek Zürich, E-Periodica, <https://www.e-periodica.ch>

flukalog – Chemie zur Sprache gebracht

Ulrich Schwartz

Inhaltsverzeichnis

| | |
|---------------------------------------|-----|
| 1. Einleitung | 219 |
| 2. Bedingungen der Forschung | 219 |
| 3. Themen der Forschung | 220 |
| 4. Die Sprache der Forschung | 220 |
| 5. lingua franca meets Software | 222 |
| 6. flukalog | 222 |
| 7. Forschen mit flukalog | 224 |
| 8. flukalog ist Dialog | 224 |
| Anmerkungen | 225 |

1. Einleitung

Das flukalog-Projekt zielt auf einen zentralen Aspekt der chemischen Forschung, auf ihre Sprache: wie denken Chemiker über Chemie nach? Wie formulieren sie ihre Fragen? Wie finden sie Antworten? Wie entsteht Forschung? Wie lernen sie von Kollegen, tauschen sie ihre Ideen aus? Es geht in diesem Feuilleton also um die Sprache einer Naturwissenschaft, Verständigung, um Kommunikation. Und darum, wie Software für die chemische Forschung dieses Gespräch verändert hat, befördert. Genau hier entfaltet flukalog seine Wirkung: diese Datenbank katalysiert das Nachdenken und das Gespräch über chemische Forschungsprobleme, gibt ihm überraschende Wendungen und bringt es voran.



2. Bedingungen der Forschung

Es ist eine typische Wettbewerbssituation, in der Forscher heute bestehen müssen: in einem Wettbewerb um die Finanzierung

von Grundlagenforschung, um die Umsetzung in innovative Produkte, um Marktanteile¹. Vor diesem Hintergrund sind für die in der Forschung arbeitenden Menschen der freie Austausch von Ideen, der Erwerb von Wissen, der Kontakt zu anderen Forschern, der ungehinderte und leichte Zugang zu deren Ergebnissen – kurz: Kommunikation, wie anders, essentiell. Das leichte und selbstverständliche Lösen seiner Verständigungs- und Informationsbedürfnisse hilft ihm, sich auf die Probleme seiner Forschung zu konzentrieren. Einige eher materielle Bedingungen setzen der Qualität seiner Forschung Grenzen: der Etat, die Ausstattung, die Geräte, die Chemikalien, die er zur Umsetzung seiner Ideen braucht; all dies ist ebenso wichtig. Und genau hier finden Informations-Broker und Chemikalien-Makler ihre Aufgabe und ihre Verantwortung².

3. Themen der Forschung

Chemische Forschung erarbeitet das Verständnis von der Wechselwirkung zwischen einzelnen Molekülen – welche Kräfte werden wirksam, was passiert und warum? Dieses Studium von Moleküleigenschaften und -reaktivitäten erst setzt uns in den Stand, die entscheidenden Fragen der Biologie zu beantworten: wie organisiert sich Materie, wie werden Informationen gespeichert und wie vervielfältigt? Ohne die Methoden der Chemiker ist eine Beantwortung nicht denkbar. Heute, an der Schwelle zur synthetischen Biologie, ist diese Wissenschaft so weit entwickelt, dass die entscheidenden Fragen gestellt und Schritt für Schritt beantwortet werden können³.

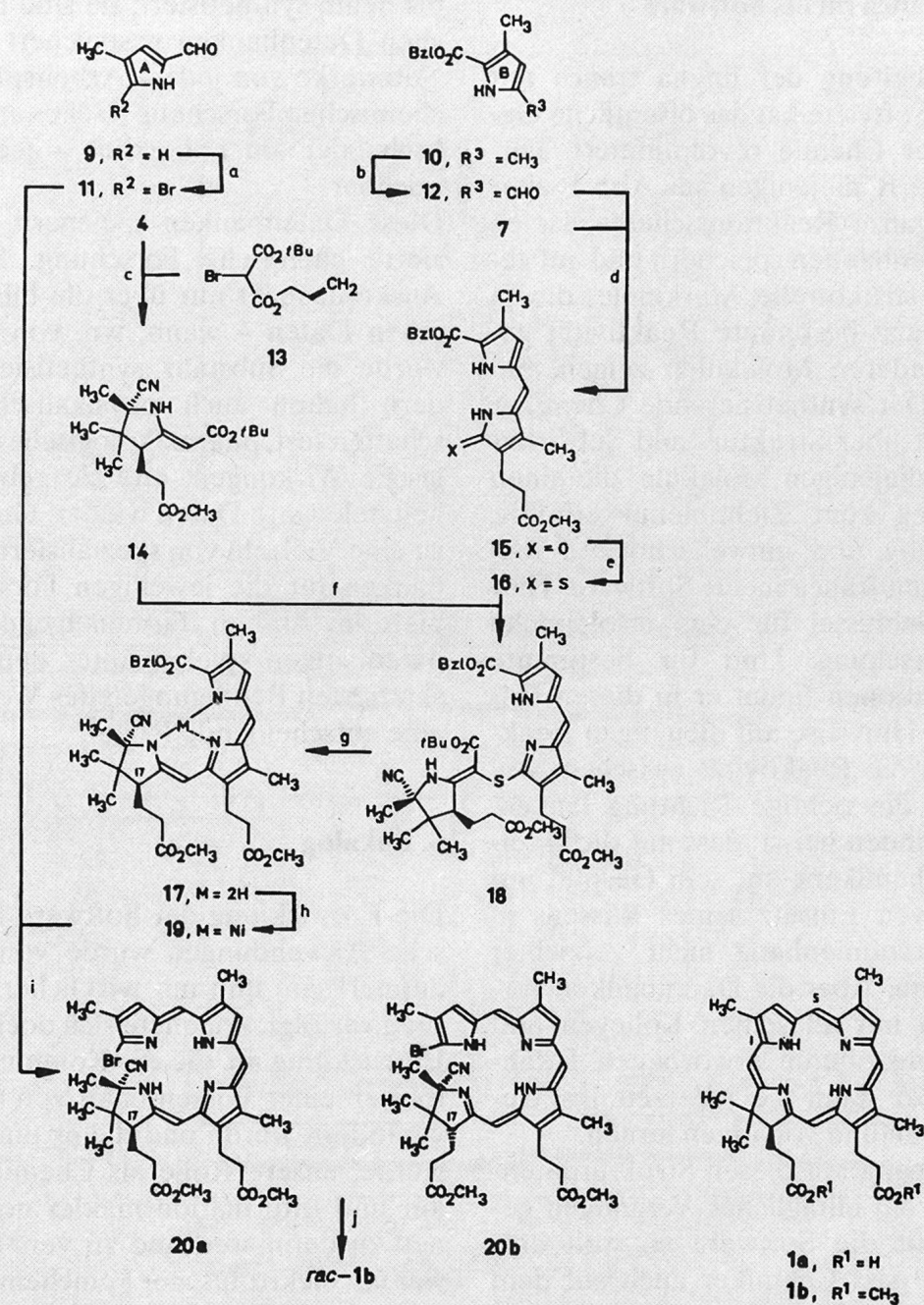
Um Moleküle zu entwerfen und dann gezielt herzustellen, um Eigenschaften von Molekülen zu synthetisieren⁴, letztlich Wirkungen, müssen sich Chemiker Bilder vom Gegenstand ihrer Forschung machen. Sie haben eine eigene Sprache entwickelt, die

sie virtuos beherrschen; in der sie ihre Fragen stellen, ihre Ideen entwickeln, ihre Lösungen formulieren.

4. Die Sprache der Forschung

Seit etwa 100 Jahren, und spätestens seit der Begründung der Konformationsanalyse in der Mitte dieses Jahrhunderts, ist der Weg frei für eine hinreichend genaue Beschreibung der physikalischen Wirklichkeit: Erkenntnisse über Moleküle können präzise festgehalten und anderen Chemikern verständlich gemacht werden.

Wir können diese Sprache hier nicht erklären und auch nicht beschreiben; ihre Schönheit erschliesst sich dem Betrachter unmittelbar, und möglicherweise auch die Artistik und Kunstfertigkeit, mit der der Forschungsgegenstand bearbeitet wurde; ihre Klarheit und Genauigkeit möchten wir einfach nur behaupten. Thema des Formelschemas in Abbildung 1 ist die Synthese eines Naturstoffes, eines biologisch aktiven, grünen Tetrapyrrolpigmentes⁵ aus kleinen Molekülen über eine Folge von Reaktionsschritten. Jedes graphische Codon hat seine Bedeutung; mit einem Blick kann der Chemiker Art und Verknüpfung der Atome, die Topologie, chemische Eigenschaften, also Reaktivitäten gegenüber anderen Molekülen erkennen, die wahrscheinliche räumliche Struktur und auch physikalische Eigenschaften meist schon sehr gut abschätzen. Die vorgestellte Forschung wird über diese Abbildungen unmittelbar verständlich, der Chemiker nimmt sie ohne Umweg auf und denkt über sie in weiteren Bildern, die sich beim Betrachten einstellen, nach. Diese Formelbilder, diese Strukturformeln, sind die chemische *lingua franca*. Diese Zeichensprache ermöglicht die Fortentwicklung der chemischen Wissenschaften. Nur durch das Denken in dieser Sprache können die Themen der heutigen chemischen Forschung gefunden und diskutiert werden.



Scheme 3. a) 1.1 equiv. Br_2 , 2 equiv. pyridine, CH_2Cl_2 , $-45^\circ C$ (77% crystalline 11). – b) 1) 2.5 equiv. lead tetraacetate, $CHCl_3$, rfl., 210 h; 2) 2.5 N aq. HCl, RT, 6 h (71% crystalline 12). – c) 1) 1 equiv. 4 + 1.1 equiv. 13, 1.2 equiv. diazabicycloundecene (DBU), CH_3CN , $0^\circ C$, 20 min (coupling). 2) $P(OC_2H_5)_3$, $80^\circ C$, 2 h (desulfurization). 3) 5.1 equiv. piperidine, $[(C_6H_5)_3P]_4Pd$, catalytic amount, THF, argon, RT, 2 h (76% crystalline 14). – d) 1.1 equiv. base [14], benzene, rfl., 10 h (88% crystalline 15). – e)

1.1 equiv. <Lawesson reagent>, THF, rfl., 30 min (90% crystalline 16). – f) 14 + 1.1 equiv. *N*-bromosuccinimide, CH_2Cl_2 , RT, 20 min; + 0.92 equiv. 16, 4 equiv. DBU, CH_3CN , RT, 40 min (product 18 reacted further, after chromatographic purification). – g) 7.6 equiv. $P(CH_2CH_2CN)_3$, CF_3CO_2H , benzene, rfl., 25 min (crude product 17 reacted further). – h) 20 equiv. $Ni(CH_3CO_2)_2 \cdot 4H_2O$, 70 equiv. sodium acetate, CH_2Cl_2 , CH_3OH , RT, 1 h (yields referred to 16: 57% epimeric mixture,

crystalline: 21% 19 and 18% C-17 epimer of 19, crystalline). – i) 19 + C-17 epimer, Pd/C, hydrogen, MeOH, RT, 1 h; + 2.5 equiv. 11, 15 equiv. TsOH, $CHCl_3$, rfl., 15 min (product 20a + 20b reacted further after chromatographic purification). – j) 1) 2.5 equiv. $Zn(CH_3CO_2)_2$, potassium *tert*-butoxide, *tert*-butyl alcohol, rfl., 1 h; 2) CH_2N_2 , ether, RT (yield referred to 19 + C-17 epimer: 42% crystalline rac-1b).

Abb.1: Die chemische Formelsprache zum Beispiel: eine Naturstoffsynthese⁵.

5. lingua franca meets Software

Die Verarbeitung der lingua franca mit moderner Software hat das öffentliche Gespräch über Chemie revolutioniert. Formelbilder, z.B. diejenigen aus Abb. 1, aber auch das ganze Reaktionsschema, lassen sich in Datenbanken speichern und auf gemeinsame strukturelle Merkmale, die ja alle eine ganz bestimmte Reaktivität gegenüber anderen Molekülen zeigen, hin abfragen. Der synthetisierende Chemiker identifiziert über Struktur- und Substruktursuchen diejenigen Moleküle, die einen Syntheseweg zum Zielmolekül effektiv, kostengünstig und umweltschonend machen – lingua franca meets Software. Hier liegt ein Schlüssel für eine erfolgreiche Wirkstoffforschung. Und für bestimmte Transformationen findet er in diesen Datenbanken Hinweise auf diejenigen Reaktionen, die die Reaktivität zwischen Molekülen in die richtige Richtung lenken. Hinweise finden heisst: dass auf die Intuition des Chemikers, auf sein Gespür, auf den kreativen Einsatz seines Wissens in diesem Zusammenhang nicht verzichtet werden kann. Aber die Datenbanken verbinden ihn mit all seinen Kollegen und ihren in Jahrzehnten erworbenen Erfahrungen: – er kann sie jederzeit ins Gespräch ziehen und von ihnen lernen.

Der Umgang mit diesen Strukturdatenbanken ist ein alltägliches Vergnügen geworden, seit die Software so weit entwickelt ist, dass Chemiker auch auf dem Bildschirm ihre Formeln rasch und leicht zeichnen können – ganz so, wie sie es beim Entwurf ihrer Forschung mit Papier und Bleistift auch tun (Abb. 2).

Computer in der Chemie – viel tragen sie dazu bei, dass sich die Wissenschaft entwickelt, dass die in ihr und für sie arbeitenden Menschen ihre wertvollen Ressourcen, Zeit und Chemikalien, zielorientiert einsetzen⁶. Strukturdatenbanken kommt dabei eine Schlüsselrolle zu. Über zwölf Millionen chemische Individuen wurden

bis heute synthetisiert; sie sind in öffentlichen Datenbanken gespeichert und über Netzwerke von jedem Arbeitsplatz in der chemischen Forschung – sei es am Schreibtisch oder am Labortisch – jederzeit erreichbar.

Diese Datenbanken speichern die publizierte chemische Forschung. Sie geben Auskunft nicht nur über die bibliographischen Daten – wann, wo, von wem, wie wurde die Substanz synthetisiert –, sondern halten auch physikalische Eigenschaften fest, pharmakologische und biologische Wirkungen, und sie geben sicherheitsrelevante Daten wieder. Gegenwärtig ist eine Vielzahl von spezialisierten Datenbanken für die jeweiligen Forschungsgebiete im Aufbau. Firmeneigene Strukturdatenbanken spielen unter den eingangs skizzierten Bedingungen des Wettbewerbs eine entscheidende Rolle⁷.

6. flukalog

Die Entwicklung der Software für chemische Anwendungen wurde von uns sehr aufmerksam und mit wirklicher Begeisterung verfolgt, zeichnete sich doch hier eine Entwicklung ab, die die Kommunikationsformen einer Wissenschaft von Grund auf verändern würde und die es uns erlauben würde, unsere Rolle als Chemikalienbroker und Informationsmakler noch einmal neu zu definieren und zu verstehen. Ziel war ein elektronischer Feinchemikalienkatalog neuen Typs. Wir wollten den Dialog in der chemischen *lingua franca* führen; uns in dieser Sprache und mit genau dem spezifischen Beitrag, genau jener Stimme und Klangfarbe am öffentlichen Forschungsdiskurs beteiligen, die nur einer Feinchemikalienfirma wie Fluka eigen ist².

Wir entschieden uns für eine enge Zusammenarbeit mit der Software Company, die das chemische Informationsmanagement in den letzten 10 Jahren gründlich verändert hat⁸. Von den Herausforderun-

Handwritten chemical reaction scheme (top):

Below the scheme is a screenshot of the FLUKALOG interface. The top navigation bar includes: Design HELP, Navigation, Search HELP, ORDER, Data Sheet, My flukalog. The main section is titled 'RESEARCH TOOL'.

The search results table shows a single entry for a chiral compound:

| Q | Chemical Structure | Chiral | re search | catalog | mp | bp | d ₂₀ ⁴ | n _D ²⁰ |
|---|--------------------|--------|-----------|---------|----|----|------------------------------|------------------------------|
| | | Chiral | | | | | | |

Below this is another screenshot of the FLUKALOG interface, showing a search for 'Q(+)-Citronellal'.

The search results table for 'Q(+)-Citronellal' shows multiple entries:

| Q | Chemical Structure | Chiral | re search | catalog | safety | mp | bp | d ₂₀ ⁴ | n _D ²⁰ |
|-------|--------------------|--------|-----------|---------|--------|----|----|------------------------------|------------------------------|
| 27467 | | Chiral | | | | | | | |
| | | | | | | | | 0.853 | 1.447 |
| | | | | | | | | 20.0 | 1 |
| | | | | | | | | 16.0 | 1 |
| | | | | | | | | substance c = | |
| | | | | | | | | e.r. | |
| | | | | | | | | Beilstein 1 IV 3515 | |
| | | | | | | | | Fieser | |
| | | | | | | | | Merck | |

Abb. 2: Die Identifizierung des Startmaterials für eine kurze Synthese. Das mittlere Bild zeigt die mit der Maus am Bildschirm gezeichnete Frage; unten wird einer von mehreren Treffern der Suche in flukalog angezeigt. Oben die Ausgangssituation im gedanklichen/gezeichneten Entwurf.

gen, die das Projekt bereithielt, seien zwei genannt: einmal zeigte sich bald, dass die für eine Desktop Application sehr grosse Datenmenge eine Weiterentwicklung von Suchalgorithmen notwendig machte; zum anderen mussten wir eine Benutzeroberfläche finden, die die Suche in den über fünfzig Datenfeldern der Datenbank sinnvoll lenken und führen würde⁹. Die konzeptionellen Vorgaben waren in der Tat sehr fruchtbar und haben zu einer Reihe von anspruchsvollen und schönen Lösungen innerhalb des hinreichend flexiblen Software-Konzepts⁸ geführt.

Mit der elektronischen Version unseres Katalog-Handbuchs, wie sie jetzt realisiert wurde¹⁰, stellen wir das Gespräch mit unseren Kollegen in der Forschung und angewandten Forschung auf eine neue Grundlage – wir sprechen nun eine gemeinsame Sprache. Damit sind wir dem Ziel, unser Wissen transparent zu machen, zu teilen und es so direkt und für unsere Gegenüber so gewinnbringend wie möglich mitzuteilen, schon sehr nahe gekommen.

7. Forschen mit flukalog

flukalog entfaltet seine Wirkung unmittelbar bei der Planung und der Vorbereitung der täglichen experimentellen Forschung. Für synthetisierende Chemiker stehen sicherlich die Struktursuchen in 18000 Produkten im Mittelpunkt. Die Suche nach Reaktivitäten, nach bestimmten Strukturelementen in diesem grossen Programm gibt wertvolle Hinweise auf die Plausibilität und Durchführbarkeit von Synthesewegen; immer wieder werden auch neue Ideen generiert beim Blättern in den Trefferlisten. Erweiterte Suchen, die physikalische Daten wie den Siedepunkt einer Verbindung mit einer besonderen Reaktivität oder Kombination von funktionellen Gruppen verknüpfen, sind besonders wertvoll. Hier eröffnet die Auswertung der Suchresultate oft völlig überraschende

Möglichkeiten. Dieses Herz von flukalog wird ergänzt durch über fünfzig weitere Datenfelder, die Anwendungen in den aktuellen chemischen, biochemischen und analytischen Forschungsfeldern präzise, umfassend und sehr direkt erschliessen.

Schliesslich wurde Sorge dafür getragen, dass durch die Aufnahme von Querverweisen der Einstieg in andere öffentliche Datenbanken und auch in gedruckte Medien jederzeit möglich ist: in diesem Kreis wird flukalog seinen Platz einnehmen als Datenbank für die experimentelle Forschung und als Delightful Companion.

8. flukalog ist Dialog

Das flukalog-Projekt ist in seinem Kern der Versuch, den Dialog zu führen, Wissen zu kommunizieren, Ideen mit dem Gegenüber zu tauschen und von ihm zu lernen. In diesem Bemühen wissen wir uns einig mit der St.Gallischen Naturwissenschaftlichen Gesellschaft; wir glauben, dass das flukalog-Zeichen auch Ideal und Ziel dieser dem Gespräch verpflichteten Gesellschaft genau trifft; es illustriert die beflügelnde Wirkung von Gesprächen, Büchern, Datenbanken und – natürlich! – die beflügelnde Wirkung dieses Berichtbandes zum 175jährigen Bestehen der St.Galler Naturwissenschaftlichen Gesellschaft.



Anmerkungen

- ¹ Vermutlich bestimmt diese Grundbedingung, in Verbindung mit individueller Neugier, viel deutlicher die Richtung, die Forschung nimmt – auch bei der Formulierung von Forschungszielen –, als es moralische und ethische, gesellschaftliche oder auch politische Kräfte tun, die doch in der öffentlichen Diskussion über Forschung so viel präsenter sind.
- ² Wissenschaftler in der chemischen, biochemischen, biologischen und analytischen Forschung wählen heute aus vielleicht 70 000 kommerziell erhältlichen Produkten aus – und bekommen sie schon morgen in ihr Laboratorium geliefert. Der Beitrag, den Feinchemikalienfirmen auf diese Weise zum Gelingen von Forschung liefern, kann nicht leicht überschätzt werden. Es sind ja nicht nur die Substanzen, die unentbehrliche Arbeitsmittel sind. Genauso wichtig, und hier liegen die besonderen Anliegen von Fluka, sind die vielfältigen, sehr weitgehenden und sehr detaillierten Informationen, die mit den Chemikalien kommuniziert werden: sehr sorgfältige analytische Prüfungen, eine genaue, auf die Anwendung ausgerichtete Spezifikation, gezielte Verweise auf wichtige Literatur; schliesslich ein vollständiges Paket von Daten für eine sichere und ökologische Handhabung der Substanzen. Viele unserer Reagenzien und ganze Produkt-Linien werden in enger Zusammenarbeit mit unseren Partnern in den Forschungslaboratorien entwickelt, so dass wir vollständige Lösungen für Anwendungen in der täglichen experimentellen Arbeit auf den aktuellen Forschungsfeldern zur Verfügung stellen können. Fluka erarbeitet also sehr aktiv in ihren Entwicklungsabteilungen und Produktionsanlagen die Voraussetzungen für das Gelingen moderner Forschung. All dieses Wissen über unsere Chemie ist in einem Handbuch niedergelegt, das 18 000 Produkte für chemische, biochemische und analytische Anwendungen auflistet, 1500 A4 Seiten umfasst, 1.975 kg schwer ist – und das ein gutes Stück dabei hilft, Forschung leicht zu machen.
- ³ Weit entfernt davon, dass alles geht, haben die chemischen Wissenschaften doch eine solche Reife erreicht, dass ein aufmunterndes Anything Goes¹¹ – und das soll ja gerade nicht heissen: mach was Du willst – durch ihre Reihen zieht.
- ⁴ Ein schönes Beispiel kommentiert W. Keller im Artikel «Ionophore – Rezeptormoleküle in ionenselektiven Sensoren» in diesem Berichtband.
- ⁵ Totalsynthese von (+)-Bonellin Dimethylester, F.P. Montforts und U.M. Schwartz, *Angewandte Chemie* 1985, 97, 767.
- ⁶ Computer werden in der Chemie vielfältig eingesetzt. Während das Finden von neuen Reaktionen und die Berechnung von Reaktionswegen heute noch nicht zum Alltag gehören, werden aber die Eigenschaften, die Gestalt von Molekülen durch ab initio- oder mit Kraftfeldrechnungen berechnet; und die Wechselwirkungen von Molekülen werden simuliert und modelliert. Das Studium von Enzym/Substrat-Reaktionen gehört zu den entscheidenden Forschungsfeldern dieses und der kommenden Jahrzehnte; gerade das Grenzgebiet zwischen Chemie und Biochemie verdankt Software wesentliche Impulse. Dem synthetisierenden Chemiker helfen interaktive Computerprogramme, komplexe Moleküle zu analysieren und geben ihm Anstösse, vielstufige Naturstoff- und Wirkstoffsynthesen effizienter zu planen und durchzuführen.
- ⁷ An der Innovationskraft der chemischen Industrie haben computerunterstützte Informations- und Dokumentationsysteme grossen Anteil. Die Forschung der grossen, weltweit operierenden Unternehmen wäre ohne diese Datenbanken nicht koordinierbar und nicht finanzierbar.
- ⁸ Tatsächlich hat hier nichts weniger als eine Revolution stattgefunden: Molecular Information Systems, Inc., San Leandro, Kalifornien, und CH-4123 Allschwil. – Auch an dieser Stelle herzlichen Dank für die erfrischende, sehr enthusiastische Zusammenarbeit im flukalog-Projekt.
- ⁹ Die Aufgabe, gutes Design – Design im Sinne einer funktionsunterstützenden, guten und schönen Formgebung – de novo zu entwickeln, war alles andere als einfach. Aber schliesslich wurde doch ein hohes Mass an Lucidität und Leichtigkeit erreicht. Unsere Freude über diesen Fall von Levitation ist dem flukalog Logo anzusehen.
- ¹⁰ flukalog ist eine elektronische eins-zu-eins-Version unseres Katalog-Handbuchs. Realisiert in ISIS/Base (Molecular Information Systems, Inc.) unter Windows. flukalog erscheint im Frühling 1995 bei Fluka Chemie AG, 9471 Buchs/SG.
- ¹¹ Paul Feyerabend, *Wider den Methodenzwang, Skizze einer anarchistischen Erkenntnistheorie*, Suhrkamp, Frankfurt am Main 1976.

