

Vom Gebrauch des "Handbooks"

Informationen, die sich nicht augenblicklich erschließen und die womöglich noch in altmodischen Büchern stehen, werden heutzutage gern schon gar nicht mehr wahrgenommen. Dabei enthält das „Handbook of Chemistry And Physics“ eine Fundgrube von wohlsortierten Daten: Dipolmomente, Umschlagspunkte von Indikatoren, radioaktive Elemente,+ Formelsammlungen – alles das und viel mehr findet man im „Handbook“. Inzwischen gibt es das „Handbook“ auch als Online-Ausgabe (www.hbcnetbase.com/), die aber nur von Bibliotheken lizenziert werden kann. Wenn man den Titel „googelt“ findet man immerhin günstige Angebote für ältere Auflagen.

Die für das Praktikum wohl wichtigste Informationsquelle ist die Tabelle „Physical Constants of Organic Compounds“, die Daten von immerhin etwa 14.000 Verbindungen enthält. Anhand eines Beispiels wird nachstehend erläutert, welche Daten und Hinweise aus den einzelnen Spalten dieser Tabelle gewonnen werden können. Diese Erläuterungen sind auch dem „Handbook“ selbst zu entnehmen. Man muss dazu nur die der Tabelle vorangestellten Erläuterungen recherchieren. Dieses Skript versteht sich deshalb als „Appetizer“, der Lust darauf machen soll, sich mit dem „Handbook“ auseinanderzusetzen. Man kann das alles zwar auch z.B. mit dem SciFinder recherchieren, aber zumindest, wenn man im Praktikum mal eben schnell nachschlagen will, ist das „Handbook“ leichter erreichbar und „schneller“.

Im Praktikum liegen mehrere Exemplare des „Handbooks“ aus! Vor allem sind es ältere Exemplare, was daran liegt, dass dort die Zusammenstellung der o.g. Tabelle für Praktikumszwecke geeigneter ist. (Die Spalte „Color, crystalline form“ ist nämlich bei neueren Auflagen weggefallen.)

Nachfolgend sehen Sie eine Zeile der Tabelle aus der 57. Auflage des „Handbooks“ (1976 – 1977).

No.	Name	Synonyms and Formula	Mol. wt.	Color, crystalline form, specific rotation and λ_{max} (log ϵ)	m.p. °C	b.p. °C	Density	n_D	Solubility						Ref.
									w	al	eth	ace	bz	other solvents	
Ω p716	Phenothiazine ...	Thiodiphenylamine.	199.28	ye pr (al), ye lf or pl (to) λ^{MeOH} 254 (4.5), 285 (3.1), 318 (3.6)	185.5–9	371 ⁷⁶⁰ 290 ⁴⁰ (sub 130 ¹)	δ	δ	s	v	v	aa s ^h lig δ CCl ₄ i	B27,63

Spalte	Erläuterung
No.	<p>Ω bedeutet, dass im „Spectra Index of Organic Compounds“ Literaturstellen publizierter Spektren angegeben sind.</p> <p>p716 Bedeutet, dass es sich um die 716te Verbindung der Tabelle handelt, die mit dem Buchstaben „P“ anfängt. Es gibt Zusatztabellen, die auf diese Codierung Bezug nehmen. Im Handbook gibt es z.B. für jede aufgeführte Substanz eine Strukturformel. Findet man diese so wie hier nicht in der Spalte „Synonyms an Formula“, so wird man in einer nachfolgenden Liste unter „p716“ fündig.</p>
Name	<p>Diese Spalte enthält den Substanznamen nach dem Nomenklatorsystem des „Handbooks“. Die Sortierung ist gewöhnungsbedürftig: Alle Substanzen sind nach dem Verbindungsstamm sortiert. Dinitrobenzol muss man also unter „B“ suchen und findet schließlich unter „Benzene“ den Eintrag: „benzene -,dinitro“.</p> <p>Manchmal muss man ganz schön umdenken: Wenn Sie „Ethylchloracetat“ suchen, müssen Sie wissen, dass das ein Essigsäurederivat ist und Sie es folglich unter „Acetic acid, dichloro-, ethyl ester“ finden. Der Vorteil dieser „Schikane“ besteht darin, dass Derivate einer Verbindung untereinander stehen und deren Daten folglich besser miteinander verglichen werden können.</p> <p>Wer mit dem Nomenklatorsystem nicht zurecht kommt, kann auch unter der Summenformel in der Tabelle „Formula Index of Organic Compounds“ suchen. Phenothiazin hat die Summenformel C₁₂H₉NS. Die Tabelle liefert zu dieser Formel die Substanznummer von drei möglichen Verbindungen, die man durch die Spalte 1 wie oben angegeben identifizieren kann.</p>
Synonyms and Formula	<p>In dieser Spalte werden weitere Substanznamen angegeben. Oft handelt es sich dabei um Trivialnamen oder aber Namen, die wie das gegebene Beispiel zeigt, den Nomenklaturregeln nicht (mehr) genügen. Bei einfacheren Verbindungen wird hier ebenfalls die Strukturformel angegeben. Handelt es sich um das Derivat einer Stammverbindung, so wird auf die Nummer der Stammverbindung verwiesen. Anhand des dort bezifferten Atomgerüsts kann man dann die Strukturformel des Derivats rekonstruieren. Auf irgendeine der beschriebenen Möglichkeiten erhält man also auf jeden Fall eine Strukturformel der Substanz.</p>
Mol.wt	Angabe des Molekulargewichtes
Color, crystalline form, specific rotation and λ _{max} (log ε)	<p>Die meisten Praktikanten lesen über diese Spalte hinweg, sind doch hier offenbar nur UV-Daten und Angaben zur Kristallform zu erwarten. Zwar trifft dies zu, jedoch wird auch angegeben, aus welchen Lösungsmitteln diese Kristalle erhalten wurden. Mit anderen Worten:</p> <p>Dies ist eine einfache Quelle, um ein zum Umkristallisieren geeignetes Lösungsmittel zu ermitteln!</p> <p>Die Bedeutung der angegebenen Kürzel ist am Anfang der Tabelle beschrieben: „ye pr(al)“ bedeutet z.B. dass aus Ethanol gelbe prismatische Kristalle erhalten werden. Bei der Umkristallisation aus Toluol sind es dagegen gelbe Blättchen oder Täfelchen. („ye lf or pl(to)“)</p> <p>Die UV-Daten sind wie folgt zu lesen: λ^{MeOH}254(4,5),285(3,1),318(3,6) bedeutet, dass das Spektrum in Methanol aufgenommen wurde und dabei Bandenmaxima bei 254, 285 und 318 nm gefunden wurden. Die jeweiligen Extinktionskoeffizienten sind in logarithmierter Form in den Klammern angegeben.</p> <p>Bei optisch aktiven Verbindungen ist ferner der Drehwinkel angegeben.</p> <p>Diese Spalte ist leider bei neueren Auflagen des „Handbooks“ fallengelassen worden.</p>
m.p. °C	Angabe des Schmelzpunktes

b.p. °C	Der Siedepunkt beträgt bei 760 torr (Es ist ein altes Buch!) 371 °C, bei 40 torr 290 °C. Bei 1 torr sublimiert die Substanz bei 130 °C. Dieser Wert steht in Klammern, weil die Temperaturangabe hier nicht ganz verlässlich ist. Ermitteln Sie für jede Auflage, in welchen Einheiten der Druck angegeben wird!
Density	Angabe der Dichte. (Für das gegebene Beispiel ist keine Angabe erfolgt) Die Dichte wird relativ zur Dichte des Wassers angegeben. Hoch und tief gestellte Zahlen am Ende geben die Temperatur der Substanz bzw. des Wassers an. So bedeutet z.B. die Angabe 1.25_{10}^{18} , dass die Substanz bei 18 °C 1,25 Mal schwerer ist als Wasser bei einer Temperatur von 10 °C. Bekanntlich hat Wasser bei 4 °C die spezifische Dichte 1, so dass die Angaben mit tiefgestellter 4 mit der spezifischen Dichte gleichzusetzen sind und in g/ml angegeben werden können. Natürlich sind solche kryptischen Bezugspunkte heutzutage nicht mehr üblich. Es gilt ja auch nur, auf diese Angaben zu achten, denn in den meisten Fällen handelt es sich um eine Messung bei 20 °C.
n_D	Angabe des Brechungsindex. (Für das gegebene Beispiel ist keine Angabe erfolgt) Die hochgestellte Zahl am Ende gibt die Messtemperatur an. Die Angabe von z.B. 1.6965^{15} besagt, dass der Brechungsindex bei 15 °C den angegebenen Wert hat. Auch hier ist es so, dass die meisten Angaben bei 20 °C ermittelt wurden, so wie es heute üblich ist.
Solubility	Es wird angegeben, ob und ggfls. wie gut die Substanz in Wasser, Ethanol, Ether, Aceton und Benzol löslich ist. Phenothiazin löst sich demnach wenig in Wasser und Ethanol. Es ist ferner löslich in Ether und sehr leicht löslich in Aceton und Benzol. Schließlich sind einige weitere Lösungsmittel angegeben: Entsprechend den Angaben löst sich die Substanz in der Hitze in Eisessig, wenig in Ligroin und ist unlöslich in Tetrachlorkohlenstoff. Unkundige Praktikanten versuchen, aus den Angaben dieser Spalte geeignete Lösungsmittel zum Umkristallisieren zu ermitteln. In diesem Falle werden sie sogar fündig. Trotzdem ist auch hier die Spalte „Color...“ die bessere Wahl, denn wer will schon freiwillig aus Eisessig umkristallisieren???
Ref.	Die Substanz ist im „Beilstein Handbuch“ im Band 27 des Hauptwerkes auf Seite 63 beschrieben. Befindet sich hinter der Bandangabe eine kleine hochgestellte Zahl, so ist das betreffende Ergänzungswerk gemeint. Auch andere Literaturquellen sind möglich. Das „Beilstein Handbuch“ war ein Recherchewerkzeug aus Zeiten, in denen es noch kein Internet gab. Insofern hat diese Spalte ihre Bedeutung tatsächlich verloren.