

[Inhaltserschließung von chemischen Mehrkomponentensystemen](#) | [Terminologie der Organischen Chemie](#) | [Terminologie der Pharmakologie](#)

Stand	01.03.2017
Kurzname	EH-S-10
Thema	Formeln, naturwissenschaftliche und technische Zeichen und Symbole
Satzart (PICA)	Ts
Satztyp (Aleph)	s
Entitätencode	saz, snz
RSWK	314,3
RDA	--
AWR	--
ERL	--
ELF	--
EH	EH-S-08
Bearbeiter	DNB/Köhn

Inhaltserschließung von chemischen Mehrkomponentensystemen

1. Grundregeln der Erschließung von Mehrkomponentensystemen und nicht verbalisierbaren Verbindungen. Zusammenfassend werden Legierungen, Gemische, Mischkristalle, Heterostrukturen, Komplexe usw. hier als Mehrkomponentensysteme bezeichnet.
- 1.1 Mehrkomponentensysteme werden, sofern ein Eigenname existiert, mit diesem Eigennamen erfasst. Als Oberbegriffe werden die Schlagwörter verwendet, die nach der Regel 1.2 kombiniert werden müssten.

Beispiel:

PICA³

150 Inconel *[spez. Legierung (vgl. Pkt. 1.2.3)]*
550 !...!Nickellegierung\$4obge
550 !...!Chromlegierung\$4obge

Aleph²

150 \$s Inconel *[spez. Legierung (vgl. Pkt. 1.2.3)]*
550 \$s Nickellegierung \$4 obge **\$9** (DE-588)...
550 \$s Chromlegierung \$4 obge **\$9** (DE-588)...

¹ Die Darstellung der PICA-Beispiele entspricht der Erfassung in der WinIBW.

² Die Aleph-Beispiele werden zur besseren Übersicht mit Spatien vor und nach den Unterfeldern dargestellt. Dies entspricht *nicht* der tatsächlichen Erfassung; zur Erfassung werden im Aleph-System Satzschablonen verwendet.

Aleph IDS³

1.2 Sofern kein Eigenname existiert, wird für jedes vorliegende System eine eigene (Teil-) Folge aus den einzelnen Komponenten den nachfolgenden Regeln entsprechend gebildet, die so spezifisch und präzise wie möglich sein sollte.

1.2.1 Bei Mehrkomponentensystemen, deren Komponenten definierte chemische Verbindungen sind, werden deren Namen kombiniert.

Vorlage: (Li,Na)O als Mischkristall

SWW s Lithiumoxid ; s Natriumoxid ; ...

aber: SW s Lithium-Natrium-Oxid
(für die stöchiometrische Verbindung mit der Strukturformel Li-O-Na)

Vorlage: Ga_xAl_{1-x}As

SWW s Galliumarsenid ; s Aluminiumarsenid ; ...

Vorlage: Epichlorhydrin-Wasser-Gemisch

SWW s Epichlorhydrin ; s Wasser ; ...

Vorlage: Natrium-Benzol-Cluster

SWW s Benzol ; s Natrium ; ...

Es tritt mindestens ein weiteres Schlagwort für das System hinzu (siehe 1.3).

1.2.2 Bei nicht verbalisierbaren Verbindungen und Mehrkomponentensystemen aus solchen werden Einfachkomposita <Element>-verbindungen kombiniert.

Ausnahme: Anionische Bestandteile von Mehrkomponentensystemen und von nicht verbalisierbaren Verbindungen werden durch spezifische Schlagwörter der Form -ate, -ite (z. B. Tellurate) wiedergegeben.

SWW s Palladiumverbindungen ; s Uranverbindungen

SWW s Tellurate ; s Halogenverbindungen

nicht: s Tellurverbindungen ; s Sauerstoffverbindungen ; s Halogenverbindungen

Analog werden auch die Hochtemperatursupraleiter behandelt:

Vorlage: YBa₂Cu₃O_{7-x}

SWW s Yttriumverbindungen ; s Bariumverbindungen ; s Cuprate

³ Die Aleph IDS-Beispiele werden zur besseren Übersicht mit Spatien vor und nach den Unterfeldern dargestellt. Dies entspricht *nicht* der tatsächlichen Erfassung; zur Erfassung werden im Aleph-System Satzschablonen verwendet.

1.2.3 Bei metallhaltigen Mischsystemen soll das System bevorzugt als Legierung, ggf. als intermetallische Verbindung angesehen werden. Es tritt die Legierungsregel 2.1 in Kraft.

1.2.4 Ist eine Anwendung der Regeln 1.2.1-1.2.3 nicht möglich, kann auf die Elementnamen ausgewichen werden.

Vorlage: Phosphordotiertes Silicium

SWW s Silicium ; s Phosphor ; s Dotierung

Vorlage: Palladiumwasserstoff (auch Palladium-Wasserstoff-System)

SWW s Palladium ; s Wasserstoff ; s Metall-Wasserstoff-System

Vorlage: Amorphes hydrogeniertes Silicium (a-Si:H)

SWW s Silicium ; s Amorpher Zustand ; s Wasserstoff

1.3 Die Art bzw. Struktur des Mehrkomponentensystems wird durch ein zusätzliches, möglichst spezifisches Schlagwort in der Folge ausgedrückt [z. B. Zweiphasensystem, Mehrschichtsystem, Metall-Wasserstoff-System, Mischkristall, Heterostruktur, Cluster, Spinglas, Dotierung (verwendet für das dotierte Material und den Vorgang)]. Mischkristalle aus Metallen und Halbmetallen werden als Legierungen angesehen (siehe 2.1.).

Die weiten Schlagwörter Binäres (Ternäres, ...) System werden verwendet, wenn dieser Aspekt thematisiert ist.

SWW s Siliciumnitrid ; s Magnesiumoxid ; s Yttriumoxid ; s Ternäres System ; s Phasendiagramm ; s Berechnung

SWW s Zirkoniumlegierung ; s Vanadiumlegierung ; s Intermetallische Verbindungen

2. Regeln für die Inhaltserschließung einiger Arten von Mehrkomponentensystemen und chemischen Komplexen in Abweichung von den Grundregeln

2.1 Legierungsregel

Legierungen (gilt i. d. R. auch für Mischkristalle aus Metallen und Halbmetallen, bei denen dann ein charakterisierendes Schlagwort hinzutritt) werden nur dann mit dem spezifischen Trivial- bzw. Handelsnamen erfasst, wenn dieser allgemein gebräuchlich, das bedeutet i. d. R. in Römpp (online) oder Wikipedia nachgewiesen ist (z. B. Bronze, Messing, Aluminiumbronze, Permalloy, Inconel; ohne Nachweis nur bei einzelnen Varianten unter dem Grundnamen, z. B. Inconel 100).

Bei allen übrigen Legierungen werden die Bestandteile kombiniert. Die Hauptbestandteile (nur Metalle bzw. Halbmetalle) werden durch Einfachkomposita mit -legierung dargestellt. Zusätze mit geringem Anteil, die in der vorliegenden Arbeit thematisiert werden, werden als Elementnamen angefügt. Im Übrigen wird das Mengenverhältnis nicht berücksichtigt, aber die Hauptkomponente, soweit ermittelbar, steht in der Folge am Anfang (vgl. 1.2). Nichtmetalle, für die kein Einfachkompositum mit -legierung gebildet werden darf, werden immer mit dem Elementnamen in die Folge aufgenommen (z. B. Phosphor).

SWW s Chromlegierung ; s Manganlegierung ; s Calcium

SWW s Vanadiumlegierung ; s Manganlegierung ; s Eisenlegierung ; s Bor

Systeme aus zwei oder mehr Metallen werden bevorzugt nach dieser Regel behandelt. Ebenso werden intermetallische Verbindungen behandelt, außer in den Fällen mit stöchiometrischen Verhältnissen, die einen Eigennamen besitzen.

Beispiele:

PICA3

150 Tantalberyllide

150 Niobzinn

150 Stibarsen

Aleph

150 \$s Tantalberyllide

150 \$s Niobzinn

150 \$s Stibarsen

Aleph IDS

2.2 Komplexe

In Komplexen gruppiert sich eine Anzahl von Liganden um ein Zentralatom bzw. mehrere Zentralatome. Daher wird jeder Komplex durch eine Kombination von mindestens zwei Schlagwörtern beschrieben.

Die Zentralatome werden als Einfachkomposita mit -komplexe dargestellt (z. B. Chromkomplexe). Liganden können entweder als definierte Verbindung oder als Kompositum mit -verbindungen, bei organischen Liganden mit -gruppe oder -derivate (bzw. eine entsprechende Pluralbezeichnung einer Verbindungsklasse) verwendet werden. (Ausnahmen: Amminkomplexe, Aquakomplexe, Carbenkomplexe, Carbonylkomplexe, Hydridokomplexe).

SWW s Chromkomplexe ; s Cyclopentadienylgruppe

SWW s Platinmetallkomplexe ; s Cyclobutadienderivate

SWW s Eisenkomplexe ; s Rutheniumkomplexe ; s Zweikernige Komplexe ; s Cyclopentadienylgruppe

In Nachschlagewerken nachgewiesene Komplexverbindungen (z. B. Cisplatin = Diammindichloroplatin, Ferrocen) werden erfasst und erhalten diejenigen Schlagwörter als Oberbegriffe, die nach obiger Regel kombiniert werden müssten.

[↑ nach oben](#)

Terminologie der Organischen Chemie

1. Die Namen chemischer Verbindungen werden – mit Ausnahme von Arzneimitteln – in der im Römpp vorliegenden Form unter Berücksichtigung der RSWK und entsprechender Erfassungshilfen erfasst. Der systematische Verbindungsname, im Römpp beim Trivialnamen angegeben, sollte bei Bedarf als abweichende Benennung erfasst werden.
2. Ist die Verbindung nicht im Römpp aufgeführt, wird unter dem eingebürgerten Trivialnamen, Handelsnamen oder eingebürgerten halbsystematischen Namen in Analogie zu bestehenden Ansetzungen erfasst.
3. Gibt es keinen Trivialnamen usw., wird bei komplizierten Verbindungsnamen i. d. R. unter der Stamm- oder Registrierverbindung als Kompositum mit "-derivate", "-analoga" u. Ä. erfasst (vgl. [EH-S-08](#) "Erfassung von Komposita bei chemischen Substanzen"). Weitere wichtige Bestandteile der Verbindungen, wie wichtige funktionelle Gruppen, sollten (z. B. als Komposita mit "-gruppe") in der Schlagwortfolge ergänzt werden (vgl. [EH-S-08](#)).

Beispiel:

Vorlage: 2,3-Dihydro-3-methyl-2-[3-(3-nitrophenyl)-2-triazenyliden]benzothiazol

PICA3

150 Benzothiazolderivate

Aleph

150 \$s Benzothiazolderivate

Aleph IDS

4. Die Pluralform wird gewählt, wenn es sich um mehrere Isomere oder Gruppenbezeichnungen handelt (vgl. RSWK § 303,2,c).

Beispiel für Isomere:

PICA3

150 Hydroxybuttersäuren

Aleph

150 \$s Hydroxybuttersäuren

Aleph IDS

Beispiele für Gruppenbezeichnungen:

PICA3

150 Acetale

150 Aldehyde

150 Catecholamine

150 Ketone

Aleph

150 \$s Acetale

150 \$s Aldehyde

150 \$s Catecholamine

150 \$s Ketone

Aleph IDS

Zu einer Stammverbindung kann sowohl die Pluralform für die Isomere als auch das Kompositum mit "-derivate" existieren. Die Schlagwörterfassung mit "-derivate" als Kompositum erhält immer eine abweichende Benennung in zerlegter Form. Neben "Derivate" als zweitem Bestandteil enthält diese abweichende Benennung als ersten Bestandteil entweder die Pluralform bei mehreren Isomeren oder die Singularform der Stammverbindung.

Beispiele:

PICA3

150 Cyclooctadiene (*für 1,2-;1,3-;1,4- und 1,5-Cyclooctadien*)

und

150 Cyclooctadienderivate

450 Cyclooctadiene\$**x**Derivate

Aleph

150 \$s Cyclooctadiene (*für 1,2-;1,3-;1,4- und 1,5-Cyclooctadien*)

und

150 \$s Cyclooctadienderivate

450 \$s Cyclooctadiene \$**x** Derivate

Aleph IDS

Die eingebürgerte Verwendung der Pluralform als Gruppenbezeichnung für Derivate einer Stammverbindung kann nur dann zu einer Erfassung führen, wenn es keine Isomere zu dieser Verbindung gibt.

Beispiel:

PICA3
150 Borazine
450 Borazinderivate

Aleph
150 \$s Borazine
450 \$s Borazinderivate

Aleph IDS

Bei Naturstoffen wird die Pluralform als Gruppenbezeichnung für natürlich vorkommende Verbindungen mit gleichem Grundgerüst verwendet, auch künstlich erzeugte Derivate der Naturstoffe werden unter der Pluralform zusammengefasst.

Beispiel:

PICA3
150 Tetracycline
450 Tetracyclinderivate

Aleph
150 \$s Tetracycline
450 \$s Tetracyclinderivate

Aleph IDS

5. Einzelne Isomere ohne Trivialnamen werden möglichst restriktiv (vgl. RSWK § 315,4) der IUPAC-Nomenklatur entsprechend erfasst. Im identifizierenden Zusatz dürfen dabei keine Zeichen unterschlagen werden. Von allen weiteren Schreibweisen werden Synonymie-Verweisungen gemacht.

Beispiele:

PICA3

Vorlage: 5-(4-Dimethylaminobenzyliden)-rhodanin

150 Dimethylaminobenzylidenrhodanin **\$g** 5-(4-Dimethylaminobenzyliden)-rhodanin

Vorlage: 3,3'-Dimethylbenzidin

150 Dimethylbenzidin **\$g** 3,3'-

Vorlage: p-Nitrophenol

150 Nitrophenol **\$g** 4-

450 Nitrophenol **\$g** p-

450 Nitrophenol **\$g** para-

Vorlage: o-Chloranilin

150 Chloranilin **\$g** 2-

450 Chloranilin **\$g** o-

450 Chloranilin **\$g** ortho-

Aleph

Vorlage: 5-(4-Dimethylaminobenzyliden)-rhodanin

150 \$s Dimethylaminobenzylidenrhodanin **\$h** 5-(4-Dimethylaminobenzyliden)-rhodanin

Vorlage: 3,3'-Dimethylbenzidin

150 \$s Dimethylbenzidin **\$h** 3,3'-

Vorlage: p-Nitrophenol

150 \$s Nitrophenol **\$h** 4-

450 \$s Nitrophenol **\$h** p-

450 \$s Nitrophenol **\$h** para-

Vorlage: o-Chloranilin

150 \$s Chloranilin **\$h** 2-

450 \$s Chloranilin **\$h** o-

450 \$s Chloranilin **\$h** ortho-

Aleph IDS

[↑ nach oben](#)

Terminologie der Pharmakologie

1. Die Erfassung von Arzneimitteln erfolgt primär entsprechend der Pharmazeutischen Stoffliste. Werden sie dort nicht nachgewiesen, folgt die Rote Liste.
2. Ist das Arzneimittel in den unter 1 genannten Nachschlagewerken nicht zu ermitteln, wird unter dem INN (Abk. für International Nonproprietary Name, Internationaler Freiname pharmazeutischer Substanzen; enthalten in einer von der WHO herausgegebenen Liste)

erfasst und dieses mit "INN" als Definition vermerkt. Existiert kein INN wird entsprechend der Anweisungen zur "Terminologie der Organischen Chemie" (s. o.) verfahren.

3. Werden in der Pharmazeutischen Stoffliste (oder anderen Werken) Verbindungsnamen wie im englischen Sprachgebrauch mit Spatium geschrieben, bei der alphabetischen Sortierung jedoch wie ein Kompositum behandelt, wird ein Kompositum erfasst.

Beispiel:

PICA3

Vorlage: Naphazolin nitrat (*Pharmaz. Stoffl.*)

150 Naphazolinnitrat

670 Pharmaz. Stoffl.

679 INN

Aleph

Vorlage: Naphazolin nitrat (*Pharmaz. Stoffl.*)

150 \$s Naphazolinnitrat

670 \$a Pharmaz. Stoffl.

679 \$a INN

Aleph IDS

[↑ nach oben](#)