

Datenbank SPORE beschreibt über 14.000 Reaktionen an festen Phasen

## Erstklassige Planungshilfe für die CombiChem-Forschung

Berlin, März 2002 - Eine hochaktuelle Informationsquelle für die Vorbereitung von Synthesen in der kombinatorischen Wirkstoff-Forschung hat das Fachinformationszentrum FIZ CHEMIE Berlin mit der Datenbank "SPORE" (Solid Phase Organic Reactions) im Programm. SPORE beschreibt Methoden, Techniken, Reaktionswege und Reaktionsdaten von mehr als 14.000 Festphasen-Synthesen, bei denen mindestens ein Reaktionsteilnehmer polymergebunden ist. Die Informationen werden aus Berichten über die Ergebnisse von Massensynthesen in Fachzeitschriften der Chemie sowie aus internationaler Patentliteratur gewonnen.

In der hochentwickelten Datenbank sind die Moleküle nicht nur nach ihren Standardrollen als Reaktant, Produkt, Reagenz oder Lösungsmittel klassifiziert, sondern auch als Polymer, Polymerträger (Solid Support) und Schutzgruppe (Protecting Group). Durch die exakte Klassifizierung der Reaktionsteilnehmer und Reaktionsbedingungen sowie eine strukturierte Speicherung kann man auf die Daten auf verschiedenen Wegen zugreifen, das heißt, nicht nur Edukte oder Produkte abrufen, sondern auch ganz gezielt nach Reagenz oder Lösungsmittel, Solid Support oder Schutzgruppe suchen. Diese Aufbereitung macht SPORE zu einer erstklassigen Planungshilfe in der CombiChem-Forschung.

Die Inhouse-Datenbank läuft unter dem in der Chemie weit verbreiteten Informationsverarbeitungssystem ISIS des amerikanischen Chemie-Informationsspezialisten MDL Information Systems, Inc. MDL und das FIZ CHEMIE Berlin stellen die Datenbank SPORE gemeinsam her.

### Weitere Informationen

FIZ CHEMIE Berlin  
Postfach 12 03 37  
D-10593 Berlin

### Ansprechpartner

Dr. Anthony Flambard  
Tel: +49 (0)30 / 399 77- 140  
Fax: +49 (0)30 / 399 77- 132

Alle Aussagen in dieser Pressemitteilung, die nicht historischen Charakters sind, beziehen sich auf die Zukunft im Sinne des U.S. Sicherheitsgesetzes. Die vorausschauenden Aussagen sind Annahmen, die auf dem gegenwärtigen Informationsstand basieren und somit gewissen Unsicherheitsfaktoren unterliegen. Tatsächlich eingetretene Ergebnisse können von den vorausgesagten Ergebnissen durch vielfältige Faktoren wesentlich abweichen, hervorgerufen z. B. durch Veränderungen bezüglich Technologie, Produktentwicklung oder Produktion, Marktakzeptanz, Kosten oder Preise der Produkte von FIZ CHEMIE Berlin und Abhängigkeiten von Kooperationen und Partnern, Genehmigungsverfahren, Wettbewerb, geistigen Eigentums oder Patentschutz- und Copyrightrechten.