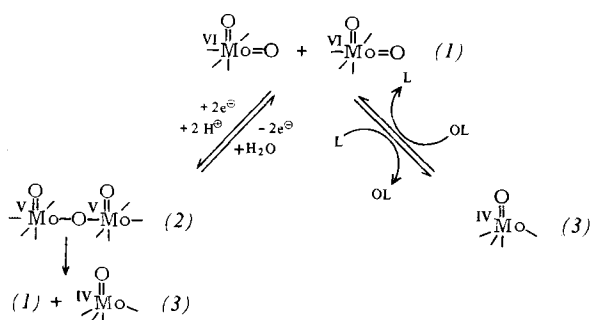


Reviews

Referate ausgewählter Fortschrittsberichte und Übersichtsartikel

Den Mechanismus der Reaktionen molybdänhaltiger Enzyme behandelt eine Übersicht von R. A. D. Wentworth. Die wichtigsten molybdänhaltigen Enzyme katalysieren die Reduktion von Distickstoff zu Ammoniak und von Nitrat zu Nitrit sowie die Oxidation von Sulfid zu Sulfat, Xanthin zu Harnsäure und von Aldehyden zu Carbonsäuren. Eine Diskussion der Chemie anorganischer Oxokomplexe von Mo^{VI} , Mo^{V} und Mo^{IV} führt zu einem neuen Vorschlag für die Wirkungsweise von Oxidasen und Reduktasen:



Im Ruhezustand enthält das Enzym zwei sechswertige hexakoordinierte Molybdänatome, die mindestens zwei Oxo-Liganden tragen (1). Unter physiologischen Bedingungen sind diese zu einer zweikernigen Mo^{V} -Spezies (2) reduzierbar; (2) kann zu einer pentakoordinierten Mo^{IV} -Spezies (3) und (1) disproportionieren. (3) ist die aktive Spezies, die durch Übernahme eines Oxo-Liganden von der oxidierten Form OL des Substrats die Reduktion besorgt (Reduktasewirkung). Als Oxidase gibt (1) einen Oxo-Liganden an das reduzierte Substrat L ab, wobei (3) entsteht. Dieser Mechanismus ist unter anderem in der Lage, die Inhibition der Xanthin-Oxidase durch Allopurinol zu erklären. [Mechanisms for the Reactions of Molybdenum in Enzymes. Coord. Chem. Rev. 18, 1–27 (1976); 136 Zitate]

[Rd 849 –H]

Über Fortschritte der Dünnschichtchromatographie, speziell über die direkte Kopplung mit thermischen Verfahren, berichtet E. Stahl. Da die Vorbereitung der Proben oft mehr Zeit als die eigentliche Analyse erfordert, wurde versucht, praktikable „on-line“-Verfahren zu entwickeln. Im einfachsten Fall wird ein heizbarer Metallblock mit Bohrung verwendet, in die ein Glaskölbchen mit der Substanz geschoben wird. Der Metallblock wird vorgeheizt oder nach einem Temperaturprogramm erhitzt; die flüchtigen Komponenten werden direkt auf eine gegebenenfalls bewegte DC-Platte geleitet. [Advances in the Field of Thermal Procedures in Direct Combination with Thin-Layer Chromatography. Acc. Chem. Res. 9, 75–80 (1976); 42 Zitate]

[Rd 857 –L]

NEUE BÜCHER

Einführung in die Theoretische Chemie. Bd. 1: Quantenmechanische Grundlagen. Von W. Kutzelnigg. Verlag Chemie, GmbH, Weinheim 1975. 1. Aufl., XXIII, 297 S., 23 Abb., 9 Tab., Leinen DM 68.—

Erfahrungsgemäß bereitet der Versuch, sich mit Grundlagen der Quantenmechanik vertraut zu machen, dem Chemiker besonders große Schwierigkeiten. Damit in engstem Zusammenhang steht auch die zumeist unkritisch positive oder negative Haltung gegenüber den zur Zeit in großer Fülle publizierten numerischen Resultaten quantenmechanischer Arbeiten. Der Autor versucht hier eine Vermittlerrolle zu übernehmen, indem er, auf möglichst gering gehaltene mathematische Voraussetzungen aufbauend, den Leser nach und nach mit dem grundlegenden Formalismus und den wichtigsten Methoden und Ergebnissen der Quantenmechanik vertraut macht. Dieses Vorhaben ist in der Tat ganz ausgezeichnet gelungen. Mathematische Formalismen, welche über die Grundtatsachen der Differential- und Integralrechnung hinausgehen, mit denen heute nahezu jeder Chemiestudent vertraut ist, werden im Anhang angeboten. Sehr positiv ist auch zu bewerten, daß es sich der Autor zum Ziel gesetzt hat, nicht über Schwierigkeiten hinwegzutäuschen. Was dem Leser an Vorkenntnissen nicht abgefordert wurde, muß er sich während des Studiums der einzelnen Kapitel sukzessive aneignen. Dementsprechend wird sich das Buch für den wenig Vorgebildeten ohne Zweifel als eine ziemlich schwierige Lektüre erweisen.

Mancher mag die Auffassung des Autors vom Gebiet der Theoretischen Chemie als etwas eng gefaßt empfinden. Entsprechend dem Inhaltsverzeichnis wird der zweite Band einen

Überblick über die Theorie der chemischen Bindung, die verschiedenen Methoden der Quantenchemie und die Resultate numerischer Berechnungen geben. Der vorliegende Band ist bereits auf dieses Ziel orientiert. Es wird ganz bewußt auf alles verzichtet, was für das Vorhaben des Autors entbehrlich erscheint. Zeitabhängige Phänomene wie Streuprozesse und molekulare Stoßtheorie, Tunnelphänomene sowie theoretische Ansätze zur Beschreibung chemischer Prozesse, die Zustände im Energiekontinuum und relativistische Effekte sind nicht berücksichtigt worden. Die numerisch verwertbaren Näherungsmethoden zur Lösung der Schrödinger-Gleichung werden naturgemäß sehr ausführlich behandelt.

Ausgehend von einem kurzen Abschnitt über die zur Beschreibung von Atomen und Molekülen wesentlichen Grundtatsachen der klassischen Mechanik werden die Postulate der Quantenmechanik vorgestellt und einige einfache Beispiele von exakt lösaren Schrödinger-Gleichungen diskutiert. Hervorzuheben ist hier, daß der Autor bemüht ist, stets die didaktisch günstigste Formulierung zu finden. So werden z. B. die Eigenzustände des harmonischen Oszillators mit Hilfe von Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren hergeleitet, während in anderen Fällen den konventionellen Lösungsmethoden für Differentialgleichungen der Vorzug gegeben wird. Eigene Abschnitte sind den Drehimpulsoperatoren und ihren Eigenschaften sowie dem Wasserstoffatom gewidmet. In zwei weiteren Kapiteln werden die wichtigsten Näherungsmethoden der Quantenmechanik, Variationsrechnung und Störungstheorie behandelt. Die restlichen sechs Abschnitte präsentieren eine umfassende Theorie der Atome, welche ausgehend von elemen-