

segas bei hohen Drücken erstmals beschrieben wurde, war sicherlich einer der Ansatzpunkte, die *Fischer* und *Tropsch* am Mülheimer Kaiser-Wilhelm-Institut für Kohlenforschung 1922 zu den Arbeiten über das „Synthol“, ein Gemisch aus überwiegend sauerstoffhaltigen Verbindungen, veranlaßten. Hierauf weist *Franz Fischer* selbst ausdrücklich in einer Kontroverse mit *Alwin Mittasch* hin (*Angew. Chem.* 40 (1927) 164 und 166). Die systematischen Untersuchungen der Reaktionsbedingungen führten dann 1925 zur drucklosen und bei niedrigeren Temperaturen ablaufenden Kohlenwasserstoffsynthese, die patentiert (D.R.P. 484337 u.a.) wurde und den Namen Fischer-Tropsch-Synthese trägt. Die Entdeckungsgeschichte beschreibt *Otto Roelen*, einer der an den damaligen Arbeiten beteiligten Mitarbeiter, in einem 1977 gehaltenen und veröffentlichten Vortrag (*Erdöl, Kohle, Erdgas, Petrochem.* 31 (1977) 524).

Matthias W. Haenel [NB 876]
Max-Planck-Institut für Kohlenforschung,
Mülheim a. d. Ruhr

Photochemie. Grundlagen, Methoden, Anwendungen. Von *G. von Bünau* und *T. Wolff*. VCH Verlagsgesellschaft, Weinheim 1987. XI, 330 S., geb. DM 98.00. – ISBN 3-527-26506-6

„Das vorliegende Buch soll die Photochemie für eine breite Leserschaft erschließen. Es wendet sich zunächst an den Photochemiker...“ und „darüber hinaus hat es aber vor allem auch den Charakter eines Lehrbuches...“. Um es gleich vorweg zu nehmen, diese Ansprüche erfüllen die Autoren in vorbildlicher Weise. Dieses Buch bietet aber noch viel mehr: Gemessen am geringen Umfang gelingt den beiden Autoren eine umfassende Darstellung der Photochemie. Im Gegensatz zu den anderen Lehrbüchern steht hier nicht mehr die Anwendung photochemischer Methoden in der organischen Synthese im Mittelpunkt, sondern die allgemeine Photochemie. Das zeigt auch die Auswahl des Stoffes, eine optimale Mischung aus Grundlagen und aktuellen Anwendungen.

Zwei einleitende Kapitel behandeln die Grundbegriffe und die photochemischen Elementarreaktionen, wobei die physikalisch-chemische Seite in den Vordergrund gerückt wird. Hierbei wird der notwendige mathematische Aufwand gering gehalten und längere Ableitungen, die beim schnellen Durcharbeiten des Textes hinderlich sind, befinden sich in einem Anhang.

Das umfangreichste Kapitel des Buches beschäftigt sich mit den Anwendungen der Photochemie, wobei deutlich wird, wie weit die Autoren den Rahmen ihrer Photochemie gesetzt haben. „Ausgewählte Gebiete der Photochemie“ bedeutet eine aussagekräftige Auswahl aus dem breiten Spektrum der photochemischen Möglichkeiten. Der organischen Photochemie kommt zwar eine besondere Bedeutung zu, dennoch ist die Zahl der Beispiele auf ein Mindestmaß reduziert. Dies ermöglicht eine sehr gestraffte Beschreibung der einzelnen Reaktionen, was für den Leser aber kein Nachteil ist, da er weitere interessante Reaktionen mit Hinweisen auf Originalliteratur in Tabellenform vorfindet. Die Rezessenten stehen dieser Teildisziplin etwas näher und vermissen deshalb die Erwähnung aktueller Entwicklungen, wie beispielsweise die chirale Induktion bei photochemischen Reaktionen in homogenen Systemen. Bei der Absicht der Autoren und bei der kompakten Darstellung des fächerübergreifenden Stoffes sind solche Ausschreibungen aber verständlich. Einige Teilbereiche der organischen Photochemie, wie asymmetrische Photoreaktionen oder Reaktionen in festen Matrices, bilden einen eigenen Abschnitt über photochemische Reaktionen in Festkörpern. Darüber hinaus werden bedeutende Themen wie die

Photochromie und die Photoleitfähigkeit ebenfalls in ihren Grundlagen behandelt. Bei den Reaktionen in heterogenen Systemen stehen der photoelektrische Effekt und die Kinetik von Photoreaktionen in micellaren Lösungen im Vordergrund. Zu einer umfassenden Darstellung der Photochemie gehört auch die Betrachtung der Vorgänge in unserer größten Photoreaktor, der Atmosphäre, wobei sowohl die natürlichen Gleichgewichte als auch die vom Menschen verursachten Störungen dieses Systems Beachtung finden. Dazu gehört dann auch die Sonnenenergie-Nutzung durch Photoreaktionen. Abschnitte über die anorganische Photochemie und die photochemische Isotopen trennung runden dieses anwendungsbezogene Kapitel ab.

Im abschließenden Kapitel über die experimentellen Methoden stehen die Strahlungsquellen der Photochemie im Mittelpunkt. Dabei wird die besondere Rolle der Laser für die moderne Photochemie herausgestellt. Der Neuling auf dem Gebiet der Photochemie findet hier aber auch erste Hinweise zu den notwendigen Bestrahlungsapparaturen, Filtern und Meßeinrichtungen.

Der Rahmen eines Lehrbuches reicht nicht aus, um die gesamte Photochemie detailliert zu beschreiben; trotzdem ist es den beiden Autoren gelungen, auf nur 330 Seiten eine präzise Einführung in dieses Gebiet zu geben. Der Nicht-Photochemiker kann sich hier schnell in die Thematik einlesen und dann – falls nötig – auf die reichlich angeführte Literatur zurückgreifen, die sowohl die speziellen Angaben der Tabellen betrifft als auch die mehr allgemeinen des Anhangs, wo er neben Lehrbüchern und Monographien vor allem neuere Übersichtsartikel zu den einzelnen Kapiteln dieses Buches findet. Damit wird ein tieferer Einstieg in die Photochemie sehr erleichtert. Dem Photochemiker verschafft dieses Buch eine aktuelle Gesamtübersicht über sein Arbeitsgebiet. Dieses Buch füllt eine Lücke und kann deshalb jedem empfohlen werden, der sich von der gesamten Photochemie ein Bild machen will. Ausstattung und Druckqualität dieses Buches lassen nichts zu wünschen übrig. Man kann den Autoren nur zu dem gelungenen Wurf gratulieren.

Martin Conrads und *Jochen Mattay* [NB 877]
Institut für Organische Chemie der
Technischen Hochschule Aachen

Dynamics of Proteins and Nucleic Acids. Von *J. A. Crammon* und *S. C. Harvey*. Cambridge University Press, Cambridge 1987, 234 S., geb. £ 25.00. – ISBN 0-521-30750-3

Das Buch will dem Leser eine in sich abgeschlossene Einführung in die theoretischen Aspekte der Protein- und Nucleinsäuredynamik vermitteln. Es richtet sich sowohl an Studenten als auch an Forscher im Bereich der physikalischen Biochemie, der Molekularbiologie und der Gentechnologie. Die Autoren haben sich folgende Ziele gesteckt: 1) theoretische Methoden und ihre Möglichkeiten zu präsentieren, 2) ein Gefühl für Art und biologische Bedeutung der Dynamik von Biomolekülen zu vermitteln – hauptsächlich durch Darstellung der Ergebnisse theoretischer Arbeiten – und 3) Ausblicke auf die zukünftige Entwicklung dieses Gebiets zu geben. Diese Ziele werden erreicht.

Das Buch ist wie folgt aufgebaut: Die ersten drei Kapitel (34 Seiten) bieten eine kurze Einführung in Funktion, Struktur und Dynamik von Proteinen und Nucleinsäuren. Kapitel 4 (44 Seiten) diskutiert die theoretischen Methoden, die zur Beschreibung und Veranschaulichung der Molekuldynamik bei diesen Verbindungsklassen verwendet worden sind. Auf dieser Grundlage wird in den folgenden vier Kapiteln (88 Seiten) anhand der Literatur der letzten

zehn Jahre das dynamische Verhalten von Protein- und Nucleinsäuremolekülen behandelt. Gliedert nach Zeit- und Raumskala der verschiedenen Bewegungsarten werden die folgenden Themen erörtert: Kurzzeitdynamik, lokale Strukturveränderungen, globale Strukturveränderungen und die Dynamik der molekularen Assoziation. Im letzten Kapitel (16 Seiten), das etwas aus dem Rahmen fällt, werden eine Reihe von Neuentwicklungen auf dem Gebiet der Computersimulation von Biomolekülen beschrieben. Das Buch wird vervollständigt durch einen Anhang (21 Seiten) über technische Details der Computersimulation, ein Literaturverzeichnis und ein Sachregister.

Die Autoren haben gute Arbeit geleistet und die oben angesprochenen Ziele erreicht. Von grundlegenden Tatsachen ausgehend faßt das Buch die Ergebnisse theoretischer Arbeiten zur Protein- und Nucleinsäuredynamik zusammen, und sorgfältig wird auf die Originalliteratur verwiesen. Es werden viele rechnerische Beispiele gegeben, und auch der Einfluß der Lösungsmittelumgebung auf Struktur und Dynamik von Biomolekülen wird berücksichtigt. Am besten läßt sich das Buch als ein Überblick über die theoretischen Arbeiten auf dem Gebiet der biomolekularen Dynamik bis zum Jahr 1986 charakterisieren. Das Buch ist – möglicherweise aufgrund seines beschreibenden Stils – nicht besonders kritisch in Bezug auf die Bewertung der unterschiedlichen Arbeiten. Der Umfang, der der Beschreibung von Anwendungen gewidmet wird, richtet sich nicht nach dem Wert der zugrundeliegenden wissenschaftlichen Methoden, sondern nur nach der Anzahl der Publikationen. Ein Beispiel sind die relativ breit präsentierten Normalschwingungsberechnungen an Proteinen, die – wie die Autoren zugeben (S. 91) – wegen der anharmonischen Proteinbewegungen nur von sehr begrenztem Wert sind. Die am meisten versprechenden praktischen Anwendungen der Simulationstechniken werden nur im letzten Kapitel erwähnt. Die Simulation der Moleküldynamik zur Verfeinerung der durch NMR-Studien oder Röntgenbeugungsanalyse ermittelten räumlichen Struktur von Proteinen und die „thermodynamic cycle integration“-Methode zur Bestimmung relativer Bindungskonstanten werden nur kurz und nicht kritisch diskutiert.

Das Buch bietet nicht genügend Information für Chemiker, die theoretische Methoden bei ihren Untersuchungen zur Struktur und Dynamik von Biomolekülen anwenden wollen. Es fehlt eine kritische Bewertung der verschiedenen, für Biomoleküle gebräuchlichen Kraftfelder. So wird bei der Diskussion über die Grenzen der Simulationstechniken (S. 66) die immer noch unzureichende Genauigkeit der Kraftfelder nicht einmal erwähnt, obwohl eine kritische Betrachtung der die Genauigkeit bestimmenden Faktoren für die Abschätzung des Werts von Simulationstechniken bei spezifischen Anwendungen unerlässlich ist. Durch kritischen und detaillierten Vergleich der experimentellen Daten würde man einen Eindruck über die Vorschlagskraft der verwendeten Methoden bekommen.

Obgleich Kapitel 4 und der Anhang einige mehr in Einzelheiten gehende technische Informationen über Simulationstechniken enthalten, sind diese Details als Anleitung für Anfänger auf diesem Gebiet nicht ausreichend. Korrekturen metrischer Tensoren, die von Transformationen von metrischen in interne Koordinaten herrühren, werden nicht erwähnt. Der Beeman-Algorithmus zur Integration von Bewegungsgleichungen wird als aussagekräftiger als der Verletz-Algorithmus bezeichnet, obwohl bewiesen ist, daß beide Algorithmen exakt identische atomare Trajektorien ergeben.

Der Gerechtigkeit halber muß man jedoch einräumen, daß die Autoren kein Handbuch für Simulationstechniken schreiben wollten und auch nicht die Absicht hatten, eine

kritische Bewertung verschiedener Methoden und Anwendungen zu bieten. Sie haben vielmehr ein Buch geschrieben, das die bisher erarbeiteten Ergebnisse gut zusammenfaßt; da diese, wie es bei neuen Gebieten nicht selten der Fall ist, über eine Vielzahl von Zeitschriften verstreut sind, ist es allemal eine Bereicherung für Bibliotheken. Ich würde dieses Buch jedem, der mehr über die Anwendung theoretischer Methoden zur Beschreibung der Protein- und Nucleinsäuredynamik wissen möchte, sehr empfehlen.

Wilfred F. van Gunsteren [NB 879]

Institut für Physikalische Chemie der
Universität Groningen (Niederlande)

Multinuclear NMR. Herausgegeben von J. Mason, Plenum Press, New York 1987, 639 S., geb. \$ 115.00. – ISBN 0-306-42153-4

In Fachkreisen ist dieses Buch lange mit Spannung erwartet worden, gerade im Hinblick auf die vielen wichtigen und neuen Akzente, die mit Hilfe der NMR-Spektroskopie in fast allen Gebieten der Chemie und in interdisziplinären Bereichen gesetzt werden. Zwölf Autoren haben die 23 Kapitel geschrieben, wobei die Herausgeberin selbst an fünf Kapiteln mitgearbeitet hat.

Der Beschreibung der Aufteilung des Buches und der Abgrenzung der Thematik (Kapitel 1) folgt eine knappe Abhandlung der Grundlagen der NMR-Parameter (Kapitel 2), an die detailliertere Diskussionen der chemischen Verschiebung (δ), Spin-Spin-Kopplungskonstanten (1J) und Relaxationsprozesse anschließen (Kapitel 3–5). Dieser Teil beansprucht ca. 25% des Buches. Er enthält notwendigerweise viel Bekanntes, stellt jedoch besonders für die δ - und J -Werte zahlreiche Aspekte heraus, die sonst etwas mühsamer den theoretischen Ansätzen zu entnehmen sind und dem präparativ orientierten Chemiker verborgen bleiben könnten. Entsprechend dem Titel des Buches werden dann ab Kapitel 6 die NMR-Parameter für die verschiedenen Kerne behandelt, beginnend mit 1H , 2H , 3H und endend mit den magnetisch aktiven Isotopen der Elemente Cu, Ag, Au, Zn, Cd, Hg (Kapitel 21). Die Aufteilung lehnt sich an die Gruppen des Periodensystems der Elemente an. Prominente Kerne (z. B. 1H , ^{11}B , ^{13}C , ^{19}F , ^{31}P) werden nur knapp behandelt, wobei vor allem anorganische oder metallorganische Fragestellungen im Vordergrund stehen. Die Nutzbarkeit dieser Kapitel ist sehr unterschiedlich, wie den nachfolgenden kritischen Anmerkungen zu entnehmen ist.

Das Kapitel 8 (^{11}B -NMR) konzentriert sich auf Polyborane und bringt dem Leser die komplexen NMR-spektroskopischen Eigenschaften dieser Verbindungen in übersichtlicher Form nahe. Dagegen ist die Zusammenfassung extrem vieler Daten im Kapitel 10 (^{13}C -NMR) versucht worden. Dies mag rein graphisch sehr übersichtlich gelungen sein, doch Detailinformationen sind überhaupt nicht verfügbar. Bei den Kopplungskonstanten werden wenige Zahlen gegeben, leider auch noch mit einem längst mehrfach korrigierten Fehler behaftet: $^1J(^{13}C^{11}B)$ in $[BMe_4]^\circ$ beträgt 39.4 und nicht 22.0 Hz. Schr wenig Raum (28 Seiten) wurde den wichtigen Kernen ^{29}Si , (^{77}Ge), ^{119}Sn , ^{207}Pb zugebilligt (Kapitel 11). Ein Fehler aus früherer Zeit ist hier nicht berichtigt: $\delta(^{119}Sn)$ von $Sn(C\equiv CH)_4$ beträgt –356.3 und nicht –279. Es ist ein Vergnügen, das Kapitel 12 (^{14}N , ^{15}N -NMR) zu lesen. Dort werden wichtige Zusammenhänge zwischen NMR-Parametern und Struktur herausgestellt, die zunehmende Bedeutung der Festkörper-NMR-Spektroskopie wurde berücksichtigt, und es sind zahlreiche jüngere Literaturstellen verarbeitet worden. Ein wenig ratlos wird man dagegen dem Kapitel 13 gegenüberstehen, z. B. wenn es um $\delta(^{31}P)$ -Werte geht. Die Bespre-