

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 biomolekulare 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 Simulationsmethoden (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 Simulationsmethoden 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 berichtet: $\delta(^{119}Sn)$ 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-

chung der $\delta(^3\text{P})$ -Werte für Phosphoratome der Koordinationszahl 1 und 2 ist sehr vage gehalten. Der Leser ist gut beraten, wenn er für die Interpretation das ausgezeichnete Kapitel 3 (oder auch Kapitel 14) heranzieht. Zur Verwirrung trägt auch bei, wenn die Verbindung [$\text{tBu}-\text{P}(\text{Cr}(\text{CO})_5)_2$] zu der Gruppe mit Koordinationszahl 2 am Phosphor gezählt wird. Dagegen wird Verbindungs klassen, die bereits in älteren Übersichten ausführlich abgehandelt wurden, viel Platz eingeräumt. In Kapitel 14 (^{17}O -NMR) vermißt man einen Hinweis auf Bor-Sauerstoff-Verbindungen, für die allein zwischen 1980–83 sehr viele $\delta(^{17}\text{O})$ -Werte berichtet wurden. Die ^{19}F -NMR-Spektroskopie (Kapitel 16) wird gemessen an ihrer Bedeutung und angesichts der zum Teil sehr weit zurückliegenden Übersichten sehr knapp besprochen. Dem praktisch arbeitenden Chemiker werden nur wenig Hilfestellungen für die Erklärung seiner Daten an die Hand gegeben. So wird z. B. festgestellt, daß die Abschirmung des ^{19}F -Kerns mit zunehmendem n in Verbindungen XF_n abnimmt, und daß dies dem Verhalten der ^{31}P -Abschirmung (die jedoch zunimmt!) in PCl_3 , $[\text{PCl}_4]^\ominus$, PCl_5 , $[\text{PCl}_6]^\ominus$ nicht unähnlich sei. Die Kapitel 19–21 (110 Seiten) über NMR-Spektroskopie mit Kernen der Übergangsmetalle geben erfreulich reichhaltige Informationen. Dieses Gebiet nimmt derzeit einen großen Aufschwung, und die hier präsentierten Daten werden künftige Arbeiten sehr erleichtern. Ansätze zur Erklärung der NMR-Parameter dieser Kerne sind komplex. Es ist daher zum augenblicklichen Zeitpunkt vertretbar, daß die Seiten überwiegend mit Daten und Graphiken gefüllt sind.

Die grobe Unterteilung der Kapitel bezüglich chemischer Verschiebungen, Kopplungskonstanten und Relaxationsverhalten wird weitgehend beibehalten. Dies erleichtert besonders „Neulingen“ den Einstieg in die Nutzung der NMR-Parameter und ist natürlich gerade dann wichtig, wenn es um weniger prominente Kerne geht. Der Aufbau des gesamten Buches gleicht damit dem Wegbereiter auf diesem Gebiet (R. K. Harris, B. E. Mann (Hrsg.): *NMR and The Periodic Table*, Academic Press, London 1978). Darum ist die auffallende Ähnlichkeit mehrerer Kapitel in beiden Büchern nicht nur darauf zurückzuführen, daß sie

zum Teil von den gleichen Autoren bearbeitet wurden. In den meisten Kapiteln finden sich zwar Hinweise auf die Anwendung der NMR-Spektroskopie von Festkörpern (zuweilen unter der Rubrik „Verschiedenes“), die große Dynamik in der Entwicklung dieser Methode wird dem Leser jedoch nicht vermittelt. Die Fülle an NMR-Daten aus Messungen in Lösung wurde meist übersichtlich aufbereitet (in Form von Tabellen und Graphiken). In den beiden letzten Kapiteln (22, 23) wurde versucht, die breite Anlage des Buches zu unterstreichen; es werden kurz NMR-Spektroskopie und bioanorganische Chemie sowie biomedizinische Aspekte behandelt. Das Bemühen, den etwas abrupten Schluß des Buches mit bibliographischen Angaben aus diesen Gebieten zu mildern, fällt positiv auf.

Das Thema „Multikern-NMR“ in einem Buch abzuhandeln, war eine schwierige Aufgabe. Für die Bewältigung des Problems, möglichst viel Stoff auf kleinem Raum (zu klein trotz der 639 Seiten!) zu komprimieren und gleichzeitig den Anspruch auf Niveau, Aktualität und Breite zu erhalten, gibt es keine perfekte Lösung. Kritik wird jedoch herausfordert, wenn in der Mehrzahl der Kapitel die Literatur nur etwa bis Mitte 1983 verarbeitet worden ist. Auch die Kosmetik der nachträglichen Einfügung vereinzelter neuerer Literaturhinweise kann über diesen Mißstand nicht hinwegtäuschen. Betrachtet man das vorliegende Buch als den Versuch, die immer schneller anwachsende Lawine an NMR-Daten in geordnete Bahnen zu leiten, so läßt sich trotz gewisser Einschränkungen ein überwiegend positives Votum abgeben. Auf dem NMR-Literatur-Markt wird derzeit kein anderes vergleichbares Werk angeboten. Darum ist die Anschaffung dieses Buches als Nachschlagewerk für Chemiker an Hochschulen und in der Industrie sicher lohnend, unabhängig davon, ob die Anwendung der NMR-Spektroskopie im Vorderfeld ihrer Interessen steht. Auch für Studenten vor und nach dem Diplom könnte dieses Buch eine schmerzhafte Lücke füllen, wenn der hohe Preis nicht dagegen stünde.

Bernd Wrackmeyer [NB 884]
Laboratorium für Anorganische Chemie
der Universität Bayreuth

Angewandte Chemie, Fortsetzung der Zeitschrift „Die Chemie“
Die Wiedergabe von Gebrauchsnamen, Handelsnamen, Warenbezeichnungen und dgl. in dieser Zeitschrift berechtigt nicht zu der Annahme, daß solche Namen ohne weiteres von jedermann benutzt werden dürfen. Vielmehr handelt es sich häufig um gesetzlich geschützte eingetragene Warenzeichen, auch wenn sie nicht eigens als solche gekennzeichnet sind.

Redaktion: Pappelallee 3, D-6940 Weinheim,
Telefon (06201) 60 23 15, Telex 465516 vchwh d. Telefax (06201) 602328.

© VCH Verlagsgesellschaft mbH, D-6940 Weinheim, 1988

Printed in the Federal Republic of Germany.

Verantwortlich für den wissenschaftlichen Inhalt: Dr. Peter Göltz, Weinheim.

VCH Verlagsgesellschaft mbH (Geschäftsführer: Prof. Dr. Helmut Grünewald und Hans Dirk Kohler), Pappelallee 3, D-6940 Weinheim, Telefon (06201) 602-0, Telex 465516 vchwh d. Telefax (06201) 602328. – Anzeigenleitung: Rainer J. Roth, Weinheim.

Satz, Druck und Bindung: Zechnerische Buchdruckerei, Speyer/Rhein



Die Auflage und die Verbreitung wird von der IVW kontrolliert.

Alle Rechte, insbesondere die der Übersetzung in fremde Sprachen, vorbehalten. Kein Teil dieser Zeitschrift darf ohne schriftliche Genehmigung des Verlages in irgendeiner Form –

durch Photokopie, Mikrofilm oder irgendein anderes Verfahren – reproduziert oder in eine von Maschinen, insbesondere von Datenverarbeitungsmaschinen verwendbare Sprache übertragen oder übersetzt werden. All rights reserved (including those of translation into foreign languages). No part of this issue may be reproduced in any form – by photostat, microfilm, or any other means – nor transmitted or translated into a machine language without the permission in writing of the publishers. – Von einzelnen Beiträgen oder Teilen von ihnen dürfen nur einzelne Vervielfältigungstücke für den persönlichen und sonstigen eigenen Gebrauch hergestellt werden. Die Weitergabe von Vervielfältigungen, gleichgültig zu welchem Zweck sie hergestellt werden, ist eine Urheberrechtsverletzung.

Valid for users in the USA: The appearance of the code at the bottom of the first page of an article in this journal (serial) indicates the copyright owner's consent that copies of the article may be made for personal or internal use, or for the personal or internal use of specific clients. This consent is given on the condition, however, that the copier pay the stated per-copy fee through the Copyright Clearance Center, Inc., for copying beyond that permitted by Sections 107 or 108 of the U.S. Copyright Law. This consent does not extend to other kinds of copying, such as a copying for general distribution, for advertising or promotional purposes, for creating new collective works, or for resale. For copying from back volumes of this journal see "Permissions to Photo-Copy: Publisher's Fee List" of the CCC.

Beilagenhinweis: Bitte beachten Sie den Prospekt des Instituts Josef Hirt AG in CH-8062 Zürich.