

Abschnitte über technische Verfahrensweisen, die vor allem im 4. und 7. Kapitel eingestreut sind. Die Formelschemata sind im allgemeinen übersichtlich und gut lesbar.

Leider wird dieser an sich positive Eindruck durch eine ganze Reihe von Schwachpunkten getrübt. Weniger ins Gewicht fallen hier die wohl unvermeidlichen, aber vom Leser leicht erkennbaren Fehler wie falsche Atomsymbole in Formelschemata (S. 131, 175), beim Umbruch verstümmelte Sätze (S. 98) sowie vertauschte Begriffe (z. B. S. 48: Darstellung von Chlorbenzol durch *Hydrierung* von Benzol). Gravierender ist hier die an einigen Stellen unpräzise Wortwahl des Autors („selektives Lösemittel“, „katalytischer Wasserstoff“), die gerade beim Nichtchemiker, an den sich das Buch ja wendet, falsche Vorstellungen erzeugen kann. Auf S. 112 wird das ein Substrat angreifende Teilchen als *Substituent* definiert; auf derselben Seite findet sich die Feststellung: „Jede organische Reaktion besteht aus mehreren Teilschritten“, woraufhin die einstufige  $S_N2$ -Reaktion vorgestellt wird. Leider setzt sich dieser Trend auch bei der Behandlung von Reaktionsmechanismen fort; ein besonders krasses Beispiel ist der Mechanismus der Veresterung einer sterisch nicht gehinderten Carbonsäure über Acylium-Ionen (S. 174). Unverständlich ist weiterhin der sorglose Umgang des Autors mit der chemischen Nomenklatur. Dabei spannt sich der Bogen von der überreichlichen Verwendung von Bindestrichen („Lithium-aluminium-hydrid“) über die falsche Nummerierung in Molekülen (TCDD, S. 58) bis zur gleichfalls inkorrektene Angabe der Bezifferung von Substituenten am Ende des Namens (Buten-1 etc.). So findet man für 2-Propanol etwa zu gleichen Teilen die Bezeichnungen Propanol-2, i-Propanol und Isopropanol, die letzten *beiden* auch im Index!

Wie im inzwischen wohl endgültig angebrochenen Zeitalter des Desktop-Publishing üblich, wurde das Typoskript offensichtlich mit Hilfe eines Textverarbeitungsprogramms erstellt und direkt reproduziert. Während man über die Vorteile und Nachteile der verschiedenen Programme wohl endlos diskutieren kann (das hier verwendete produziert viel zu sperrige Überschriften und Indices!), so bleibt unverständlich, warum für den Ausdruck des Textes ein Matrixdrucker anstelle eines Laserdruckers verwendet wurde; dieser (geringe) Mehraufwand hätte den Augen des Lesers an mancher Stelle gutgetan. In Anbetracht all dieser Mängel kann das vorliegende Buch nur sehr bedingt empfohlen werden.

*Norbert Krause* [NB 1073]

Institut für Organische Chemie  
der Technischen Hochschule Darmstadt

**Computer-Aided Molecular Design.** Herausgegeben von *W. G. Richards*. IBC Technical Services, London 1989. VII, 266 S., geb. £ 95.00. – ISBN 1-85271-054-3

Computerunterstütztes Protein-Design hat in den letzten Jahren ein großes Interesse sowohl im industriellen als auch im akademischen Bereich gefunden. Anwendungs- („Drug Design“) und grundlagenorientierter Forschung (Verständnis von Struktur/Wirkungs-Beziehungen) eröffnen sich hier faszinierende Möglichkeiten. Während ein durchgängig geschriebenes Werk zu diesem Thema wohl wegen der Heterogenität der benötigten Methoden noch aussteht, gibt es bereits eine Anzahl von Symposiumsberichten, die das Thema aber zwangsläufig unvollständig und nur punktuell behandeln. Im vorliegenden Band wird nun mit Beiträgen verschiedener Autoren, die aus mehreren von IBC veranstalteten „European Conferences on Computer-Aided Molecular Design“ stammen, der Versuch unternommen, das Thema er-

schöpfend zu behandeln. Dies hat aber zur Folge, daß manche Artikel mehrere Jahre alt sind und neuere Entwicklungen nicht mehr erfaßt werden.

Im Vorwort wird erwähnt, daß sich das Werk sowohl an Neulinge als auch an solche Wissenschaftler wendet, die ihr Arbeitsgebiet erweitern wollen. Dies ist eine Umschreibung der Tatsache, daß die Autoren in ihren Beiträgen sehr unterschiedliche Konzepte verfolgt haben. Während in manchen Kapiteln (z. B. 1, 2 und anderen) versucht wird, einen Überblick über ein Teilgebiet zu geben, werden in anderen (z. B. 9 und 11) spezielle Bereiche, diese jedoch alles andere als erschöpfend, behandelt. Gleches gilt für die in den einzelnen Beiträgen zitierte Literatur, die in einigen Fällen nur wenig über die eigenen Arbeiten des Autors hinausgeht, in anderen aber eine repräsentative Übersicht darstellt.

In den 21 Kapiteln des Buches werden tatsächlich weite Bereiche des Moleküldesigns erfaßt. So bietet Kapitel 1 (*Murray-Rust*) einen Überblick über die international vorhandenen Strukturdatenbanken, und in Kapitel 2 findet der Leser eine ausgezeichnete Einführung in die Kraftfeldmethoden; Anwendungen quantenmechanischer Verfahren, insbesondere bei der Simulation aktivierter Enzymkomplexe, werden in Kapitel 3 und „Free-Energy-Perturbation“-Methoden in Kapitel 4 beschrieben.

Kapitel 5 bietet einen kurzen summarischen Abriß über die „Distance-Geometry“-Methode, die heute bei NMRspektroskopischen Untersuchungen von Proteinen häufig zur Entwicklung einer Startstruktur verwendet wird. Ein allgemeiner Überblick über die Ermittlung räumlicher Strukturen von Proteinen in Lösung durch NMR-Spektroskopie findet sich in Kapitel 17 (*Clore, Gronenborn et al.*) und auschnittsweise in einem kurzen Kapitel 16 (*Wüthrich et al.*).

In Kapitel 6 werden einige Aspekte der im Moment nur von vergleichsweise wenigen Arbeitsgruppen benutzten Methoden der symbolischen Beschreibung und Analyse von Molekülkonformationen erläutert.

Einen ausgezeichneten Überblick über die beim Drug-Design verwendeten Konzepte liefert *Marshall* in Kapitel 8; *Müller et al.* (Kap. 10) geben dazu eine interessante konzeptionelle Alternative; methodische Aspekte werden auch in Kapitel 12 von *Goodford* beschrieben.

Bei der Strukturvorhersage und beim Design von Proteinen, die selbst heute nur basierend auf der bekannten räumlichen Struktur eines homologen Proteins möglich sind, treten völlig andere Probleme als bei niedermolekularen Substanzen auf. Hier weist der vorliegende Band weite Lücken auf. Die verwendeten Verfahren werden leider nur sehr summarisch und unvollständig in Kapitel 13 präsentiert. Einige Aspekte der Protein-Darstellung auf schnellen Graphik-Workstations werden in Kapitel 14 erläutert, ein Verfahren zur Identifizierung und Einordnung antigener Bereiche in Proteinen wird in Kapitel 15 beschrieben.

Die letzten Beiträge befassen sich mit Anwendungen des Moleküldesign in Gebieten, in denen diese Methode erst seit sehr kurzer Zeit genutzt wird, nämlich in der Materialwissenschaft (mikroporöse Materialien, Kap. 18, Materialien allgemein, Kap. 21) und der Katalysatorforschung (Zeolithe, Kap. 19, heterogene Katalyse, Kap. 20).

Am Schluß des Buches finden sich auf 16 Seiten etwas zusammenhanglos die zu den Beiträgen gehörigen Farbtafeln. Dies mag zwar drucktechnisch preisgünstiger sein, beim Lesen ist es allerdings etwas umständlich.

Die hier nicht erwähnten Kapitel 7, 9 und 11 passen eigentlich nicht in das Konzept des Bandes, da sie spezielle Anwendungen und nicht allgemein verfügbare Software beschreiben.

Sicherlich ist das Buch nicht das aus einem Guß geschriebene Werk, das ein solches Thema verdiente; die Artikel sind

teilweise nicht mehr ganz aktuell, wichtige Teilbereiche wie die Bestimmung der räumlichen Struktur von Molekülen durch Röntgenstrukturanalyse und Teilbereiche des Protein-Design fehlen, manches ist jedoch von kompetenten Autoren erschöpfend behandelt. Wenn man daneben noch berücksichtigt, daß es kaum ein anderes Buch gibt, in dem so weite Bereiche des Moleküldesign im Überblick dargestellt sind, so kann man das Buch nur jedem empfehlen, der sich über diese moderne und rationale Methode, Substanzen mit neuen Eigenschaften zu entwickeln, informieren will.

*Dietmar Schomburg* [NB 1065]  
Gesellschaft für Biotechnologische  
Forschung, Braunschweig

**High Pressure Chemical Synthesis.** Herausgegeben von *J. Jurczak* und *B. Baranowski*. Elsevier, Amsterdam 1989. X, 507 S., geb. Hfl. 320.00. – ISBN 0-444-88187-5

Früher, in der guten alten Zeit, da setzte sich einer hin, wenn er genügend zu wissen glaubte, und schrieb ein Buch. Heute, wo anscheinend keiner mehr etwas allein überschaut, da überzeugt man seine wissenschaftlichen Freunde (oder ein Verlag oder „Series Editor“ besorgt dies), etwas zu tun für ein Gebiet, das schließlich hochentwickelt und zukunftsreich ist. Daraus entsteht dann ein Werk, dessen Teile häufig besser sind als das Ganze.

Das mir vorliegende Buch *High Pressure Chemical Synthesis*, herausgegeben von *J. Jurczak* und *B. Baranowski* von der Polnischen Akademie der Wissenschaften in Warschau, ist ein Viel-Autoren-Buch: In 13 Kapiteln (plus Einleitung der Herausgeber) geben 18 Autoren ihre Erfahrungen auf dem Gebiet der chemischen (?) Hochdruck-Synthese preis. Daß mehr als die Hälfte der Autoren (10) wie die Herausgeber der Polnischen Akademie der Wissenschaften angehört, zeigt, welche Bedeutung man dort der Intensivvariablen „Druck“ zur Unterstützung chemischer Reaktionen beimißt. Dies macht ja auch Sinn, obwohl der Bunsenbrenner noch immer, verglichen mit dem Hochdruckautoklaven oder der Hochdruckpresse, das wohlfeilere Gerät ist. Jene Reaktionen (und Verfahren) herausgearbeitet zu haben, die ohne Druck nicht vernünftig oder gar nicht ablaufen, ist das Verdienst der Initiative auch der Herausgeber dieses Buches.

In der Einleitung weisen die Herausgeber darauf hin, daß die Erde ein einzigartiges Hochdruck-Labor für die Synthese vieler anorganischer Stoffe (Minerale) sei. Dies gilt aber wohl auch für den Bereich der organischen Synthese. Der thematische Bogen des Viel-Autoren-Buches ist dementsprechend weit gespannt.

Nur vier Kapitel behandeln Anorganika: *O. Fukunaga*, Tokio: Superharte Materialien; Diamant, kubisches Bornitrid. *S. Porowski, I. Grzegory, J. Jun*, Warschau: Metallnitride; hauptsächlich III-V-Halbleiter, aber auch Molybdännitride. *B. Baranowski, S. M. Filipek*, Warschau: (Übergangs-)Metallhydride. *G. Demazeau*, Bordeaux: Oxide; Eisen, Cobalt und Nickel in hohen Oxidationsstufen. Es werden demnach nur die technisch interessanten Stoffklassen angesprochen; vieles, wie Fluoride, Sulfide oder Festkörperreaktionen/Phasenumwandlungen unter hohem Druck, fehlt ganz.

Die übrigen neun Kapitel sind dem organisch-chemischen (bis hin zum biochemisch/biologischen) Umfeld zuzurechnen: *N. S. Isaacs*, Reading: Offenkettige Systeme. *J. W. Scheeren*, Nijmegen: (Carbo-)Cyclische Systeme. Hier wie auch in den folgenden Kapiteln tritt der Einfluß des Druckes auf die Reaktionsgeschwindigkeit durch negative Aktivierungs- und Reaktionsvolumina klar zutage. *A. Golebiowski*,

*J. Jurczak, S. Pikul*, Warschau: Monosaccharide; hier wird der Einfluß des Druckes auf die Regio- und Stereoselektivität organischer Reaktionen herausgearbeitet. *M. Chmielewski, J. Jurczak*, Warschau:  $\beta$ -Lactame und andere N-Heterocyclen; durch Cycloaddition und -kondensation. *J. Jurczak, M. Pietraszkiewicz*, Warschau: Cryptanden und andere Wirtmoleküle. *J. Jurczak, A. Rahm*, Warschau bzw. Bordeaux: Organische Synthese mit Organometallreagentien oder Katalysatoren. *Y. Taniguchi*, Kyoto: Biologisch interessante Materialien; Aminosäuren, enzymkatalysierte Reaktionen. *G. Luft*, Darmstadt: Polymere; ein technisch außerordentlich wichtiges Gebiet, bei dem die Vorteile der Hochdruck-Synthese besonders deutlich werden. *G. Jenner*, Straßburg: „C<sub>1</sub>-Chemie“; Synthese von „Basischemikalien“ aus Kohlenmonoxid und Wasserstoff, auch dies ein technisch sehr vielversprechendes Gebiet, das ohne Druck und Katalysator nicht auskommt.

Jedes Kapitel ist als „Review“ strukturiert und enthält demgemäß ausreichend Verweise auf Originalliteratur. Der umfangreiche Autorenindex (24 Seiten) hilft, wenn denn die Autorennamen dem Leser etwas sagen, die einschlägigen Arbeiten herauszufinden. Auch das Sachregister ist sicherlich hilfreich. Insgesamt ein Buch von 507 Seiten, mit vielen Schreibmaschinen/Druckern geschrieben (für den Ästheten wenig ansprechend und im Zeitalter kompatibler Computer auch nicht mehr zeitgemäß), sicherlich mehr ein Band einer Review-Zeitschrift als ein Lehrbuch: jedes Kapitel mehr für den Spezialisten geschrieben als für den, der sich einen Überblick über Hochdruck-Synthese verschaffen möchte. Leider wird auch der hohe Preis einer weiten Verbreitung des verdienstvollen Werkes entgegenstehen; für betuchte Bibliotheken ist es aber uneingeschränkt für die Abteilung „Fortschrittsberichte“ zu empfehlen.

*Gerd Meyer* [NB 1069]  
Institut für Anorganische Chemie  
Universität Hannover

**Electrochemical Reactors, Their Science and Technology. Part A: Fundamentals, Electrolysers, Batteries and Fuel Cells.** Herausgegeben von *M. I. Ismail*. Elsevier, Amsterdam 1989. XVIII, 548 S., geb. Hfl 265.00. – ISBN 0-444-87139-X

Das vorliegende Buch ist der erste von insgesamt drei Bänden zum Thema „Electrochemical Reactors“. Nach Angaben des Herausgebers im Vorwort soll Band A die Grundlagen von elektrochemischen Reaktoren, Batterien und Brennstoffzellen, Band B spezielle Reaktoren und Band C Produktionstechniken für kommerzielle Reaktoren und mathematische Modelle für die in elektrochemischen Reaktoren ablaufenden Vorgänge umfassen. Als Leser sollen sowohl Fachleute als auch Studenten angesprochen werden.

Der erste Band enthält neben einer kurzen allgemeinen Einführung in das Gebiet 14 umfangreichere Artikel namhafter Autoren, die den Stand des Wissens zu einzelnen Bereichen dokumentieren. Dabei werden grundlegende Themen (Thermodynamik, Elektrodenkinetik, Wärme- und Stoffübertragung, Strömungsmechanik), allgemeinere Gesichtspunkte (Konzepte für elektrochemische Prozesse, allgemeine technische Probleme, Regelungssysteme) sowie spezielle Fragen (Elektroden, Elektrolyte, Diaphragmen, Werkstoffe, Prozeßkontrollsysteme) behandelt. Batterien und Brennstoffzellen ist jeweils ein eigener Beitrag gewidmet.

Die Qualität der einzelnen Beiträge ist nach Meinung des Rezessenten genauso heterogen wie das äußere Erscheinungsbild des gesamten Buches: sie reicht von sehr guten