

Buchbesprechungen werden auf Einladung der Redaktion geschrieben. Vorschläge für zu besprechende Bücher und für Rezensenten sind willkommen. Verlage sollten Buchankündigungen oder (besser) Bücher an folgende Adresse senden: Redaktion Angewandte Chemie, Postfach 101161, W-6940 Weinheim, Bundesrepublik Deutschland. Die Redaktion behält sich bei der Besprechung von Büchern, die unverlangt zur Rezension eingehen, eine Auswahl vor. Nicht rezensierte Bücher werden nicht zurückgesandt.

**Computational Chemistry Using the PC.** Von D. W. Rogers. VCH Verlagsgesellschaft, Weinheim 1990. VIII, 224 S., geb. DM 98.00. - ISBN 3-527-27937-7

„Computational Chemistry“ ist ein nicht sehr exakt definierter Begriff. Gemeint sind damit im vorliegenden Buch im wesentlichen Molekülmechanik und Molekülorbital-Berechnungen und deren zugrundeliegende numerische Methoden. Im Gegensatz zu den zahlreichen Monographien, die die Theorie der Molekül- und Quantenmechanik behandeln, wird hier versucht, eine Einführung in die Programmierung solcher Methoden und den Umgang mit ihnen zu geben. Um es vorwegzunehmen: Ich halte den Ansatz für sinnvoll und die Ausführung für gelungen. Die meisten „Computerchemiker“ haben den Zugang zu diesem Gebiet im Quereinstieg durch Weiterentwicklung bereits bestehender Programmsysteme gefunden und mußten sich die notwendige numerische Mathematik aus verschiedenen Quellen erarbeiten. Das vorliegende Buch bietet nun eine systematische Einführung von den grundlegenden numerischen Methoden bis zur Arbeit mit fertigen HMO- und SCF-Programmen. Jedes Kapitel ist mit zahlreichen Übungen ausgestattet, zu denen meist auch die Lösung mitgeliefert wird. Eine didaktische Neuheit – zumindest im Rahmen eines Lehrbuchs – sind die „Computerprojekte“. Dies sind Anleitungen zur Lösung physikalisch-chemischer Probleme unter Verwendung von Computerprogrammen. Die zumeist in Basic geschriebenen Programme sind dem Buch auf einer 5 1/4-Zoll-Diskette beigelegt und unter DOS auf jedem IBM-kompatiblen PC lesbar und lauffähig.

Das Buch gliedert sich in zwei Teile. In den ersten Kapiteln werden die Grundlagen zur Programmierung numerischer Methoden gelegt. Iterative Methoden und numerische Integration sind durch Beispiele aus der Physikalischen Chemie (z. B. van-der-Waals-Gleichung, Wiensches Gesetz und Maxwell-Boltzmann-Verteilung) erläutert. Matrix-Operationen und Kurvenanpassung schließen sich an. Die letzten sieben Kapitel beschäftigen sich mit Molekülorbital-Rechnungen, Molekülmechanik und Molekülgraphik. Spätestens bei der Behandlung der MO-Theorie stößt der Autor auf die bereits aus der Problemstellung herrührende Schwierigkeit, entweder in die Quantentheorie einführen zu müssen (und damit den Rahmen des Buches zu sprengen) oder sie vorauszusetzen. Er entscheidet sich für einen Mittelweg. Die theoretischen Einführungen sind kurz und sehr gestrafft. Beim Selbststudium des Buches sollten daher die wichtigsten

Grundlagen bekannt sein, oder es sollte ein Lehrbuch der theoretischen oder physikalischen Chemie bereit liegen. Unter diesen Voraussetzungen liefern die Kapitel über Molekülmechanik und MO-Verfahren (Hückel, EHT, PPP, MNDO, ab initio usw.) einen tieferen Einblick in die Arbeitsweise dieser Programme.

Das Buch schließt eine wichtige Marktlücke zwischen den (wenigen) Büchern zur Anwendung der am weitesten verbreiteten Molekülmechanik- und MO-Programme auf chemische Probleme (z. B. T. Clarks Buch „A Handbook of Computational Chemistry“) und den reinen Lehrbüchern der Theoretischen Chemie. Es wird gezeigt, daß bei dem heutigen Entwicklungsstand der PCs bereits anspruchsvolle Software auf billiger, für fast jeden Studenten erschwinglicher Hardware nutzbringend anwendbar ist. Im Gegensatz dazu steht der hohe Preis des Buches. Dafür darf sich das Auge an der vom VCH-Verlag gewohnten, perfekten Satztechnik erfreuen. Das vorliegende Buch eignet sich hervorragend zum Selbststudium für Dozenten und Studenten ab Vordiplom. Vor allem Anwendern der Black-Box-Programmsysteme wie GAUSS oder MOPAC, die gern ein wenig besser verstehen möchten (sollten), was sie rechnen, kann man das Buch wärmstens empfehlen.

Rainer Herges [NB 1132]  
Institut für Organische Chemie der  
Universität Erlangen-Nürnberg

**Metals and Ligand Reactivity.** Von E. C. Constable. Ellis Horwood, New York 1990. XII, 246 S., geb. \$ 54.50. - ISBN 0-13-577222-2

Die stürmische Entwicklung der neuen metallorganischen Chemie mit ihren teilweise exotischen Strukturen und Bindungsverhältnissen hat seit etwa 1960 die klassischen Koordinationsverbindungen vorübergehend in den Hintergrund gedrängt. Standen letztere noch in den fünfziger Jahren aufgrund der erfolgreichen Verknüpfung von Spektroskopie, Reaktivität und Ligandenfeldtheorie im Mittelpunkt molekularer anorganischer Chemie, so dringt erst allmählich wieder ihre Bedeutung, hauptsächlich über das neu entstandene Forschungsgebiet *Bioanorganische Chemie*, ins allgemeine Bewußtsein zurück. Unabhängig von den erstaunlichen Leistungen der Metallzentren in Enzymen sind jedoch durch nicht-metallorganische Koordination ermöglichte oder katalysierte organisch-chemische Transformationen unentbehrlich für die synthetische und technische Praxis. Wer hieran unmittelbar interessiert ist oder die klassische Koordinationschemie als langweilig, theorieüberladen und irrelevant empfunden hat, der findet in *Constables* Darstellung ein überaus lesbares Buch zum bequemen Nachholen. Im Mittelpunkt dieser Monographie steht die Beeinflussung der Reaktivität Heteroatomdonor-kordinierter organischer Verbindungen durch (Übergangs-)Metallzentren.

Die Lesbarkeit dieses Buches wird vor allem durch Konzentration auf synthetische Nützlichkeit, durch weitgehenden Verzicht auf physikalisch-chemische Reaktionsdaten sowie durch Abwesenheit von Zitaten im Text gefördert. Weiterführende Literatur ist am Ende des Buches nach Themenbereichen zusammengestellt – notfalls gibt vermutlich der Autor detailliertere Auskunft.

Zu Beginn führt *Constable* mit aller Kürze in die notwendigen Orbitalmodelle ein; bei der qualitativen Darstellung chemischer Reaktivität bleibt leider der Aspekt der Katalyse

unberücksichtigt. Die koordinative Bindung mit und ohne  $\pi$ -Wechselwirkung wird vom elektrostatischen und geometrischen Standpunkt gut nachvollziehbar beschrieben. Reaktionsbeispiele beginnen mit Kapiteln über den Angriff von Nucleophilen, einschließlich  $\text{H}_2\text{O}$  und  $\text{OH}^-$ , an metallkoordinierte Carbonylverbindungen und deren Derivate (Nitrile, Imine) sowie an Schwefelverbindungen und Phosphorsäureester. Es folgt ein Kapitel über den elektrophilen Angriff an metallstabilisierte Anionen wie Enolate oder Thiolate und an neutrale Basen (metallinduzierte Amin  $\rightarrow$  Imin-Transformation).

In einem weiteren Kapitel werden zum Ringschluß führenden Templat-Reaktionen sowie allgemein die Besonderheiten makrocyclischer Systeme in Bezug auf Stabilität, Beständigkeit, Metall-Selektivität und geometrische Spannungen bei nicht perfekter Metall-Einpassung diskutiert. Etwas speziell, aber doch immer wieder faszinierend sind die Darstellungen supramolekularer Gebilde, einschließlich der Knoten-Moleküle. Die Besonderheiten aromatischer Substrate werden mit Schwerpunkt bei den Substitutionsreaktionen metallkoordinierter N-Heterocyclen vom Pyridintyp abgehandelt. Bei der Darstellung von Redox-Prozessen beschränkt sich der Autor auf die praxisrelevanten, mechanistisch jedoch manchmal trügerischen Übergangsmetall-katalysierten Reaktionen mit  $\text{O}_2$ ; hier wird endlich erfreulich klar zwischen Elektronenübertragung, Dehydrierung und Sauerstoff-Transfer unterschieden. Das mit „Envoi“ überschriebene letzte Kapitel enthält in einer sehr knappen und daher etwas vereinfachten Form den Versuch einer allgemeinen Rationalisierung der Leistungen koordinierter Metall-Ionen in Enzymen.

Zusammenstellung und Präsentation sind klar und übersichtlich, entsprechend dem exzellenten Vortragsstil des Autors. Die zahlreichen Formeln sind bis auf einige Ringsysteme und die inkonsistente Verwendung von Pfeilen für koordinative Bindungen gelungen. Allerdings enthält das Buch nur wenige der wegen ihrer scheinbaren Anschaulichkeit beliebten Strukturdarstellungen aus Röntgenbeugungsuntersuchungen, wodurch ein etwas schematischer Eindruck von Komplexgeometrien entsteht. Hervorzuheben sind insbesondere die Zusammenfassungen am Ende jedes Kapitels und die im Text eingestreuten knappen Bewertungen. Wer also mit relativ geringem Geld- und Zeit-Aufwand ein Maximum an praktisch nützlichen Kenntnissen der Koordinationschemie erwerben will, dem ist dieses Buch uneingeschränkt zu empfehlen.

Wolfgang Kaim [NB 1131]  
Institut für Anorganische Chemie  
der Universität Stuttgart

**Adolf Butenandt. Biochemiker, Hormonforscher, Wissenschaftspolitiker.** Von P. Karlson. Wissenschaftliche Verlagsgesellschaft, Stuttgart 1990. 336 S., geb. DM 78.00. – ISBN 3-8047-0830-7

Es ist schon ein Wagnis, die Biographie eines bedeutenden Wissenschaftlers und Menschen zu dessen Lebzeiten zu verfassen, dazu noch von einem seiner engsten Schüler. Braucht eine Biographie nicht einen gewissen Abstand? Kann ein Schüler und naher Vertrauter, wie Peter Karlson, eine Biographie über seinen „Chef“ und Lehrer verfassen, ohne in übertriebenes Lob oder Ressentiments zu verfallen? Das vorliegende Werk straft solche Bedenken Lügen.

24 Jahre lang war Karlson in Butenands Nähe, Jahre, die in Butenands vielseitigem Leben besonders wechselvoll waren, Jahre, in die der Beginn der Virusforschung, der Insek-

ten- und Hormonforschung und der Genprodukt-Hypothese fällt. An den letzteren Arbeiten war Karlson zum großen Teil beteiligt. Nicht nur diese Jahre sind lebendig und fesselnd beschrieben; der Autor hat ausführliche Recherchen über Butenands Kindheit und Jugend, über seine Heimatstadt, über seine Studienzeit angestellt, und er hat das spätere Leben Butenands mit liebevollem Interesse weiterverfolgt. Es ist ihm eine sachliche und eindrucksvolle Darstellung des Lebens dieses großen Forschers gelungen, gefüllt mit wissenschaftshistorischem Material, sachlicher Information, aber auch mit persönlichen und zeitgeschichtlichen Details.

Ich kenne Adolf Butenandt erst aus meiner Zeit in der Max-Planck-Gesellschaft seit 1964 persönlich; natürlich waren mir seine Arbeiten von früher bekannt. Ein Kriterium in der Beurteilung eines Menschen der älteren Generation ist für mich sein Verhalten in der Hitlerzeit, und da möchte ich aus Karlsons Buch Butenands erzwungene Ablehnung des Nobel-Preises zitieren:

– „Butenandt wurde in das Reichskultusministerium bestellt. An der Tür stand ein baumlanger SS-Mann, der nichts sagte, sondern nur als Wache dastand. Auf dem Schreibtisch lag ein Ablehnungsbrief, der sehr harsche Formulierungen enthielt. Menzel sagte: ‚Diese Entwürfe haben auf dem Tisch des Führers gelegen und seine Billigung erfahren, deshalb darf am Text auch nichts verändert werden‘. Butenandt las den Brief, fand ihn unmöglich und sah sich außerstande, ihn sofort zu unterschreiben. Er bekam 3 Tage Bedenkzeit. Menzel entließ ihn mit den Worten: ‚Aber bitte bedenken Sie, welche Konsequenzen es für Sie und Ihre Familie haben wird, wenn Sie im Kriege einen Führerbefehl nicht befolgen!‘ Adolf Butenandt kam mit schweren Gewissensnöten nach Hause und besprach sich mit seiner Frau. Nach langen Überlegungen beschlossen sie gemeinsam, daß Butenandt diesen Brief nicht unterschreiben, sondern stattdessen einen höflich-sachlichen Brief nach Stockholm senden sollte. Wenig später kamen Alfred Kühn und Fritz von Wettstein. Sie kannten auch den Text, den Butenandt unterschreiben sollte. Beide beschworen ihn, im Hinblick auf die drohende politische Situation keinen unsinnigen Widerstand zu leisten. Kühn sagte wörtlich: ‚Ich verlasse Ihre Wohnung nicht, bevor Sie uns nicht versprochen haben, daß Sie keinen Unsinn machen. Mit einer Weigerung erreichen Sie nichts, Sie rennen ins Verderben mit Ihrer Familie und mit Ihrem Institut. Das ist sinnlos‘. Diese Unterredungen, insbesondere mit seinen Freunden Kühn und Wettstein, haben Butenandt dann doch bewogen, den Brief zu unterschreiben. . . Es ist für Butenandt noch immer eine schmerzliche Erinnerung, daß er damals der Bitte des Präsidenten und dem Drängen seiner Freunde nachgegeben hat. Er sagte, das sei das einzige Mal, daß er etwas Unwahres unterschrieben habe!“ – Welcher Wissenschaftler der jüngeren Generation kann ermes sen, was damals im Lande und in der Seele mancher seiner Menschen vor sich gegangen ist? Es ist gut, daß in der Biographie solche Dinge so offen behandelt werden.

Das Lebenswerk von Adolf Butenandt in so zusammengefaßter und zugleich gut lesbarer Form vor sich Revue passieren zu lassen, erweckt in mir erneut Bewunderung für die Vielseitigkeit dieses Forschers. Nachdem er sich den Nobel-Preis durch die Entdeckung und Strukturaufklärung der Sexualhormone bereits verdient hatte, sind noch mindestens zwei oder drei vergleichbare wissenschaftliche Großtaten gefolgt: Die Arbeiten auf dem Gebiet der Virusforschung, die Isolierung und Aufklärung der Insektenhormone und schließlich die durch Kühn angeregte Beschäftigung mit den Genprodukten. Leider ist es wissenschaftsgeschichtlich vergessen worden, daß Butenandt schon 1940 die „Ein-Gen-ein-Enzym“-Theorie aufgestellt hat, also mindestens fünf Jahre vor George Beadle.