

Buchbesprechungen werden auf Einladung der Redaktion geschrieben. Vorschläge für zu besprechende Bücher und für Rezessenten 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.

Host-Guest Molecular Interactions. From Chemistry to Biology. (Reihe: Ciba Foundation Symposium No. 158.) Wiley, Chichester, 1991. IX, 278 S., geb. £ 39.50. – ISBN 0-471-92958-1

Anfang Juli 1990 veranstaltete die Ciba Foundation in London ein Symposium mit dem Thema Molekulare Erkennung. In einer kleinen, aber glänzend besetzten Runde fanden 15 Vorträge statt, die den Inhalt des vorliegenden Bandes bestimmen. Nach einer Einführung von I. Sutherland steht am Beginn ein Beitrag von J. F. Stoddart über die Anwendung von Charge-Transfer-Wechselwirkungen zum Aufbau von Catenanen und Rotaxanen. Über seine Versuche, mit Kronenetherderivaten künstliche Ionenkanäle zu erzeugen, berichtet anschließend G. W. Gokel. Der folgende Abschnitt ist einer anwendungsnahen Fragestellung gewidmet, der Umsetzung chemischer Information in elektrische Signale. Die nötige Selektivität läßt sich durch synthetische Wirtsmoleküle vermitteln, z.B. Calixarene im Falle eines auf Kalium-Ionen ansprechenden Feldeffekttransistors (D. N. Reinhoudt). Aber auch Enzyme können dazu verwendet werden, Substrate spezifisch in elektrochemisch nachweisbare Produkte zu überführen. W. J. Albery gelang auf diesem Weg die Bestimmung des Blutzuckergehaltes *in vivo*. Die nächsten Themen sind Komplexe zwischen Antibiotika der Vancomycin-Familie und Peptiden (J. P. Walther und D. H. Williams) sowie J. Rebeks bekannte Rezeptormoleküle unter anderem für Adenin, die sich von Kemps Tricarbonsäure ableiten. R. Breslows Beitrag beschreibt kooperative Effekte bifunktioneller Moleküle bei der Bindung von Substraten, der Katalyse supramolekularer Reaktionen und im Zusammenhang mit der Auslösung von Differenzierungsprozessen bei Tumorzellen.

In der zweiten Hälfte des Buches stehen Biopolymere im Vordergrund, zunächst Nucleinsäuren und ihre Komplexe mit Antibiotika (M. Waring). N. T. Thuong und C. Hélène stellen Oligonucleotid-Acridin-Konjugate vor, die über die Bildung von Tripelhelices sequenzselektiv an DNA zu binden vermögen. Ein Bericht über Herstellung und Eigenschaften Dithioat-modifizierter DNA von M. H. Caruthers ergänzt diesen Abschnitt. Den nächsten Themenkreis bilden Fragen zur strukturellen Selbstorganisation von Proteinen und von Enzym-Substrat-Komplexen mit Beiträgen von G. C. K. Roberts (NMR-Untersuchungen an Dihydrofolat-Reduktase), R. I. Carey und M. Mutter (Synthetische Proteine mit templatgesteuertem Faltungsverhalten), A. B. Ed-

mundson (Bindung von Peptiden an Immunglobuline) und R. U. Lemieux (Stabilität von Komplexen zwischen modifizierten Tetrasacchariden und einem Lectin). Die von Lemieux am Lectin gewonnenen Erfahrungen führen überdies zu neuen Vorstellungen über die Rolle assoziierter Wassermoleküle beim Zusammenlagern amphiphiler Oberflächen, die hier zur Diskussion gestellt werden. Ansätze zur Beschreibung von Wirt-Gast-Wechselwirkungen durch Molecular Modeling (J. G. Vinter) beschließen den Band.

In Buchform vorliegende Konferenzberichte weisen zwangsläufig gewisse Nachteile auf: Heterogenität der Kapitel, relativ hohe Preise infolge geringer Auflage, vor allem aber die Tatsache, daß oft bereits zum Zeitpunkt ihres Erscheinens ähnliche, wenn nicht ausführlichere Aufsätze derselben Autoren in gängigen Zeitschriften zu finden sind. Der besprochene Band ist in dieser Hinsicht keine Ausnahme, zumal die einzelnen Beiträge sehr knapp gehalten sind. Er ist deshalb aber keineswegs überflüssig, denn durch die Wiedergabe der Diskussionen wird hier erreicht, was ein einzelner Aufsatz sonst nicht vermag, nämlich etwas vom Geist einer Tagung festzuhalten, in der durch regen Gedankenauftausch neue Aspekte der vorgestellten Arbeiten sichtbar werden. Der Anteil der Diskussionen, deren wesentliche Stichworte dem Leser durch Literaturhinweise und Graphiken verdeutlicht werden, ist dementsprechend groß. Zusätzlich sind drei als „General Discussion“ bezeichnete Gesprächsrunden zu interessanten, übergeordneten Themen enthalten. Ein Teilnehmer-, ein Autoren- sowie ein kurzes Schlagwortverzeichnis runden das mit Sorgfalt gestaltete und auch drucktechnisch solide Buch ab, das allen einschlägig Interessierten durchaus empfohlen werden kann.

Michael Göbel

Institut für Organische Chemie
der Universität Frankfurt

Similarity Models in Organic Chemistry, Biochemistry and Related Fields. (Series: Studies in Organic Chemistry, Vol. 42.) Herausgegeben von R. I. Zalewski, T. M. Krygowski und J. Shorter. Elsevier, Amsterdam, 1991. XV, 694 S., geb. Hfl 420.00. – ISBN 0-444-88161-1

Ähnlichkeitsuntersuchungen sind in der Chemie zur Zeit hochaktuell. Dabei konzentriert sich eine wachsende Zahl von Arbeiten auf die Ähnlichkeitsmodellierung – ein Gebiet, das sich seit den sechziger Jahren stetig entwickelt hat. Die Ursprünge reichen von der Anwendung der Hammett-Gleichung in biologischen Zusammenhängen über Untersuchungen zu linearen Beziehungen der Freien Energie (LFER) bis zu Korrelationsanalysen in der Organischen Chemie (CAOC). Heute umfaßt die Ähnlichkeitsmodellierung unter anderem hochentwickelte Techniken zur Datenbehandlung, eine große Vielfalt von Verfahren quantitativer Struktur-Wirkungs-Beziehungen (QSAR) und neue Methoden der Mustererkennung. Hintergrund aller Bemühungen ist es, für eine Reihe praktischer Anwendungen maßgeschneiderte chemische Verbindungen zu entwerfen. Dies schließt die Charakterisierung der Verbindung durch geeignete molekulare Deskriptoren und anschließendes Clustern dieser Deskriptoren durch Ähnlichkeitsmodellierung ein. Das ganze Verfahren ist so verfeinert worden, daß prinzipiell Moleküle jedes Genres entworfen werden können. In der Praxis wird es jedoch fast ausschließlich zur Entwicklung biologisch aktiver Moleküle, z.B. Pharmazeutika, verwendet.

Auf Grund des potentiellen Wertes der Ähnlichkeitsmodellierung wächst die Zahl der Bücher, die sich damit beschäftigen. Zu den wichtigen Veröffentlichungen der jüngsten Zeit zählen Willets „Similarity and Clustering in Chemical Information Systems“ und das Kompendium von Johnson und Maggiora (Herausgeber) über „Concepts and Applications of Molecular Similarity“. Das hier besprochene Buch kann als dritter Teil einer Trilogie betrachtet werden, deren Bände den Lesern den jeweils aktuellen Stand der Entwicklung auf dem Gebiet der molekularen Struktur-Eigenschafts-Beziehungen vermitteln sollen. Der erste Band, von Chapman und Shorter herausgegeben, „Advances in Linear Free Energy Relationships“, erschien 1972, der zweite Band, „Correlation Analysis in Chemistry: Recent Advances“ von denselben Herausgebern, erschien 1978. Alle drei Bände sind mit John Shorter verbunden, der seit einem Vierteljahrhundert für seine Arbeiten auf diesem Gebiet bekannt ist. Auch der dritte Band reflektiert zeitgemäße Gedanken zur Chemometrie. Darüber hinaus wurden alle elf Kapitel von bedeutenden Forschern geschrieben, und der Leser erhält die Gelegenheit, unter verschiedenen Herangehensweisen und Blickwinkeln den modernsten Stand der Ähnlichkeitsmodellierung kennenzulernen.

Die Nachteile, die mit der Beteiligung so vieler Autoren verbunden sind, sind offensichtlich. So finden sich viele Überschneidungen: In den Kapiteln 1, 2, 4, 6, 8 und 10 werden z.B. verschiedene Aspekte der Hammett-Gleichung diskutiert, und die Kapitel 2, 5, 6, 8 und 9 beschäftigen sich mit Lösungsmittelleffekten. Generell neigen die Autoren dazu, sich auf ihre Spezialgebiete unter Ausschluß neuer Entwicklungen in der Ähnlichkeitsmodellierung zu konzentrieren. Das zentrale Thema wird dadurch brückstückhaft und zweifellos nicht umfassend behandelt. Während die Datenstatistik und die Rolle der sterischen Effekte einen Schwerpunkt bilden, werden andere ebenso wichtige Themen nur kurz erwähnt – beispielsweise die vielfältigen Anwendungen von topologischen Indices, neue Entwicklungen bei Molekülform-Deskriptoren, quantitative Näherungen zur Erkennung molekularer Ähnlichkeit und die Nutzung von ab-initio-quantenchemischen Methoden für den Vergleich molekularer Ähnlichkeit auf der Grundlage von Elektronendichten. Ferner sind die einzelnen Kapitel nicht alle mit gleichhohem Standard geschrieben. Die Beiträge der nicht-englischsprachigen Autoren müßten in den meisten Fällen dringend sprachlich überarbeitet werden. Insgesamt gesehen wird in diesem Band ein viel zu großes Gewicht auf die eher traditionellen Methoden der Struktur-Wirkungs-Beziehungen gelegt. Zu wenig Aufmerksamkeit erfahren die spannenden neuen Entwicklungen, die dieses Gebiet jetzt beherrschen.

Zu den einzelnen Kapiteln: Kapitel 1 (Krygowski und Wozniak) enthält eine recht starke Dosis Statistik einschließlich einer grundlegenden Diskussion der Statistik in der Regressionsanalyse. Dieses Thema wird umfassend behandelt, und auch geeignete Beispiele fehlen nicht. Die Aufnahme eines solchen Kapitels ist eine gute Idee und wird von Anwendern der Ähnlichkeitsmodellierung begrüßt werden. Es ist hilfreich, daß anspruchsvolle Software wie SPSS, die verschiedene statistische Optionen enthält, auf dem Markt erschienen ist. In Kapitel 2 (Shorter) werden die Anwendungen und die Entwicklung der Hammett-Beziehung bis heute referiert. Shorter zeigt überzeugend, daß die Hammett-Beziehung, obwohl sie schon 1937 aufgestellt wurde, vor allem in ihren vielparametrischen Formen viele wichtige Anwendungsbereiche hat. Die Kapitel 3 (Godfrey) und 4 (Häfelin ger) behandeln Substituenteneffekte. In ersterem geht es um die Übertragung dieser Effekte in organischen Systemen, in letzterem um das Verhalten von Wasserstoff als Substituent in organischen π -Systemen. Es wird hervorgehoben, daß ge-

genwärtige Modelle die Chemie vereinfachen und daß infolgedessen Interpretationen, die nur auf der Annahme von induktiven oder Resonanzeffekten beruhen, wahrscheinlich unzulänglich sind. Kapitel 5 (Laurence) illustriert, wie das Ähnlichkeitsprinzip auf die Korrelation von IR- und UV-spektroskopischen Daten mit Lösungsmittel- und Substituenteneffekten angewendet wurde. Das Prinzip erweist sich als nützliches Werkzeug zur Organisation und Analyse vieler Datensätze. In Kapitel 6 (Langhals) wird das eher umstrittene Problem von Lösungsmittelleffekten im Zusammenhang mit binären Lösungsmittelgemischen behandelt. Dieses Kapitel enthält etliche nützliche Tabellen der betreffenden Parameter. Die Kapitel 7 (Oszczapowicz), 8 (Jaworski und Kalinowski) und 9 (Zalewski) bekräftigen die Vorstellung, daß Ähnlichkeitsmodellierung normalerweise das beste Hilfsmittel zum Aufstellen von Struktur-Eigenschaftsbeziehungen in den entsprechenden Gebieten der Gaschromatographie, der Organischen Elektrochemie und der Lebensmittelchemie ist. In den beiden erstgenannten Kapiteln werden lineare Beziehungen der Freien Energie verwendet, wohingegen in letzterem eine Hauptkomponentenanalyse einschließlich mathematischer Grundlagen diskutiert wird. Kapitel 10 (Livingstone) bietet einen Überblick über quantitative Struktur-Wirkungsbeziehungen und ist eines der am besten lesbaren Kapitel des Buches. Es ist nicht nur eine nützliche Einführung in dieses Gebiet, sondern berichtet auch über wichtige Fortschritte, die seit den späten siebziger Jahren gemacht wurden. Dieses Kapitel enthält 513 Zitate und einen Anhang mit einer Liste von Software-Anbietern. Kapitel 11 (Chariton) zeigt einen eigenen Lösungsweg des Autors zur quantitativen Beschreibung von sterischen Effekten. Dieses Kapitel ist ebenfalls gut geschrieben und informativ. Unter anderem enthält es mehrere Tabellen mit Atomradien und zwei Abschnitte als Anhang mit Parametern für Regressionsgleichungen. Das Register des Bandes ist ausreichend, obwohl ich mehr Mehrfacheintragungen gewünscht hätte.

Dieses Werk ist nicht umfassend genug in der Behandlung des Themas, und es ist auch nicht wirklich brauchbar als Einführungstext für die verschiedenen Anwendungen der Ähnlichkeitsmodellierung. Es ist aber für diejenigen interessant, die sich mit den mehr konventionellen Methoden zur Untersuchung von Struktur-Wirkungs-Beziehungen in der Chemie beschäftigen.

Dennis H. Rouvray
University of Georgia
Athens, GA (USA)

Crystalline Symmetries. An Informal Mathematical Introduction. Von M. Senechal. Adam Hilger, Bristol (England), 1990. XI, 137 S., geb. £ 19.50. – ISBN 0-7503-0041-8

Im allgemeinen kommen Chemiker mit der Geometrie von Strukturen, der Algebra der Stöchiometrie und den Differentialgleichungen der Kinetik gut zurecht, und die meisten von ihnen haben gelernt, mit den Eigenwertproblemen der Quantenmechanik zu leben. Was die weniger geläufigen Gebiete der Mathematik wie Gruppentheorie, Graphentheorie oder Topologie angeht, so haben viele Chemiker (wenn der Rezensent als typischer Vertreter betrachtet werden darf) nur eine vage Vorstellung von den mathematischen Grundlagen und verwenden die Terminologie auf eine Weise, die man bestenfalls als intuitiv und idiosynkratisch bezeichnen darf. Diskutiert man die Anwendung der Mathematik in der Chemie mit einem echten Mathematiker, so kann dies zu einer unangenehmen, verwirrenden und geradezu demütigenden Erfahrung werden.