

Auf Grund des potentiellen Wertes der Ähnlichkeitsmodellierung wächst die Zahl der Bücher, die sich damit beschäftigen. Zu den wichtigen Veröffentlichungen der jüngsten Zeit zählen Willetts „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 bruchstückhaft 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 gleichem 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 Anwendungsgebiete hat. Die Kapitel 3 (Godfrey) und 4 (Häfelinger) 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 (Char-ton) 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 Mehrfacheintragen 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.

Mit diesem kleinen, treffend betitelten Buch gibt M. Senechal, eine Spezialistin auf dem Gebiet der mathematischen Kristallographie, dem Leser eine Einführung in die mathematischen Grundlagen der Kristallographie an die Hand, deren Lektüre für Chemiker und Materialwissenschaftler, die sich mit kristallographischen Fragestellungen beschäftigen, und auch für andere Interessenten unterhaltsam und lohnend sein dürfte.

Knapp zwei Drittel des Textes behandeln geläufige Konzepte wie Symmetrie, Gitter und Raumgruppen; da das Buch von einer Mathematikerin für Experimentalwissenschaftler geschrieben wurde, geschieht dies jedoch auf eine völlig neuartige Weise. Bekannte und weniger bekannte Begriffe wie Orbit, Restklasse, Voronoï-Zelle, Isometrie und symmorph Raumgruppe werden eindeutig definiert und anschaulich illustriert. Einfache Theoreme werden bewiesen, andere werden angeführt oder mit Hinweis auf ein ausführliches Verzeichnis weiterführender Literatur skizziert. Nach der Lektüre dieses Buches bereitet einem die Behauptung, daß es 4901 vierdimensionale Raumgruppen gebe, oder die Unmöglichkeit von Raumgruppen mit fünfzähliger Drehachse weniger Schwierigkeiten. Die Darstellung ist meist verständlich und zufriedenstellend, jedoch erschwert eine unnatürliche Definition der Dichte eines zweidimensionalen Gitters auf Seite 56 die Verknüpfung des reziproken Gitters mit der Kristallform.

In anregenden, aber weniger umfassenden Kapiteln werden moderne Themen wie Farbsymmetrie und N-dimensionale Kristallographie vorgestellt, auch Penrose-Muster und lokale fünfzählige Symmetrie finden Erwähnung. In der Bibliographie sind unter anderem zwanzig seit 1980 erschienene Bücher und Zeitschriftenartikel angeführt. Ein fünfzehnteiliges Kapitel enthält eine Diskussion der Kristallklassifizierung und Hinweise zur Interpretation der Raumgruppeninformationen in den „International Tables for X-Ray Crystallography.“

Im ganzen Buch, insbesondere im ersten Kapitel, wird ein besonderes Augenmerk auf die historische Entwicklung der Kristallographie als experimentelle, mathematische wie auch als künstlerische Wissenschaft gerichtet. Hierdurch gelingt es auf wirkungsvolle Weise, das Interesse des Lesers nicht erlahmen zu lassen und zugleich die thematischen Zusammenhänge näher zu beleuchten. Ein vierseitiger Anhang vermittelt in knapper Form Informationen über die Beiträge von 34 Naturphilosophen und Mathematikern – von Plato bis Roger Penrose – zur Kristallographie.

Professor Senechal weist darauf hin, daß es, trotz der Tatsache, daß der französische Mathematiker Jordan bereits 1868 die echten Bewegungen (Drehungen, Translationen, Drehungen um Schraubenachsen) mit den Bravais-Gittern verknüpft hatte, weitere 23 Jahre dauern sollte, bis Fedorov und Schoenflies durch Hinzunahme der Spiegelungen, Gleitebenen und Drehspiegelungen, durch die Enantiomere ineinander überführt werden können, alle 232 Raumgruppen gefunden hatten. Dies mutet seltsam an, da Pasteur bereits 1850 durch die Entdeckung des Zusammenhangs zwischen der molekularen und der morphologischen Chiralität die Notwendigkeit solcher uneigentlicher Symmetrieelemente aufgezeigt hatte. Senechal fragt sich daher, ob „...[diese Verzögerung] auf Unterschiede der wissenschaftlichen Disziplinen oder auf Sprachbarrieren zurückzuführen war? Gibt es heute ähnliche Klüfte, von denen wir nichts ahnen?“ Durch eine einfache Einführung in die mathematischen Grundlagen der Kristallographie sollte dieses kleine Buch dazu beitragen, eine heute noch existierende Kluft zwischen wissenschaftlichen Disziplinen zu überbrücken.

J. Michael McBride

Department of Chemistry, Yale University
New Haven, CT (USA)

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.

© VCH Verlagsgesellschaft mbH, W-6940 Weinheim, 1992. – Satz, Druck und Bindung: Konrad Tritsch Druck- und Verlagsanstalt Würzburg GmbH.

Printed in the Federal Republic of Germany

Telefon (06201) 602-0, Telex 465516 vchwh d, Telefax (06201) 60 23 28, E-Mail Z16@DHDURZ2 in Earn Bitnet

Geschäftsführer: Hans Dirk Köhler, Dr. Karlheinz Köpfer

Verantwortlich für den wissenschaftlichen Inhalt: Dr. Peter Göltz

Anzeigenleitung: Rainer J. Roth



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 photoprint, 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 Vervielfältigungsstücke für den persönlichen und sonstigen eigenen Gebrauch hergestellt werden. Die Weitergabe von Vervielfältigungen, gleichgültig zu welchem Zweck sie hergestellt werden, ist eine Urheberrechtsverletzung.

Der Inhalt dieses Heftes wurde sorgfältig erarbeitet. Dennoch übernehmen Autoren, Herausgeber und Verlag für die Richtigkeit von Angaben, Hinweisen und Ratschlägen sowie für eventuelle Druckfehler keine Haftung. – This journal was carefully produced in all its parts. Nevertheless, authors, editor and publisher do not warrant the information contained therein to be free of errors. Readers are advised to keep in mind that statements, data, illustrations, procedural details or other items may inadvertently be inaccurate.

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 percopy 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.