

bis, sondern über 350 bar liegen. Daß sich Glycoproteine bilden beim Abspalten von Acetylneuraminsäure aus bestimmten Hetero-Oligosacchariden, wird den Biologen und Chemikern als falsch auffallen, aber den Ingenieuren?

Proteaseinhibitoren werden definiert als Proteine (MG 6000–46000), dabei finden sich in der Tabelle auch kleinere Peptide wie Pepstatin. Chemische Verbindungen wie Diisopropyl-fluorophosphat und Phenylmethan-sulfonylfluorid werden unter diesem Stichwort überhaupt nicht erwähnt, sind aber an anderer Stelle im Lexikon aufgeführt – sogar mit Querverweis, was die Verwirrung steigert.

Die angeführten kritischen Bemerkungen beziehen sich auf eine kleine Stichprobenzahl, die sich aus dem Interesse der Referentin ergaben. Sie sollen den guten Gesamteindruck, den das Lexikon vermittelt, nicht wesentlich schmälen, sondern Anregungen bieten zur Verbesserung in einer zweiten Auflage. Insgesamt muß man den Herausgebern dankbar sein, ein so umfangreiches Material in kurzer Zeit verständlich aufbereitet zu haben. Das Nachschlagewerk ist allen einschlägig arbeitenden Labors zu empfehlen. Bei der zunehmenden Verflechtung in Europa dürfte sich auch die im Anhang zusammengefaßte Übersetzung der Stichwörter ins Englische, Französische, Italienische und Spanische als sehr nützlich erweisen.

*Maria-Regina Kula*  
Institut für Enzymtechnologie  
der Universität Düsseldorf

**Transition Metal Oxides. An Introduction to their Electronic Structure and Properties.** (Reihe: International Series of Monographs on Chemistry, Vol. 27.) Von *P. A. Cox*. Oxford University Press, Oxford, 1992. IX, 284 S., geb. 37.50 £. – ISBN 0-19-855570-9

Wie im Vorwort des Buches erwähnt, reicht das Interesse an Oxiden der Übergangsmetalle bis weit in die Antike zurück. Diese Verbindungen haben heutzutage eine enorme Bedeutung in der Technischen Chemie, ob als Magnetpigmente, Weißpigmente, Lasermaterialien (Granate) oder Röntgenfluoreszenzmaterialien ( $\text{BaWO}_4$ ). Auch in der Grundlagenforschung spielen sie eine große Rolle, und ihre Untersuchung führte zum tieferen Verständnis vieler physikalischer Eigenschaften des festen Zustandes. Ein vorläufiger Höhepunkt ist sicherlich die Entdeckung der neuen Hochtemperatursupraleiter (Oxocuprate), deren Untersuchung den engen Zusammenhang von Struktur und Eigenschaften im Festkörper verdeutlicht.

Der Schwerpunkt des Buches liegt nicht auf der Präsentation der großen Vielfalt der Übergangsmetallocide, sondern eher auf der Diskussion von Übergangsmetallociden verschiedenster elektronischer Eigenschaften. Im ersten Kapitel werden zunächst einige chemische Grundbegriffe der Festkörperchemie wie Oxidationsstufe, Nichtstöchiometrie von Verbindungen, Phasenregel und Phasendiagramme kurz abgehandelt. In gleicher Kürze werden die Koordination der Übergangsmetallatome durch O-Atome, die Verknüpfung der entsprechenden Polyeder und Defekte in Strukturen diskutiert. Abschließend wird ein Überblick über elektronische Eigenschaften gegeben.

Das zweite Kapitel beschreibt im wesentlichen die Modelle zur Interpretation elektronischer Strukturen. Diese reichen vom rein ionischen Bild der Ligandfeldtheorie über die Molekülorbital(MO)-Theorie bis hin zur Theorie der Bandstruktur. Auch Zwischenmodelle wie das Hubbard-Modell und die Anderson-Lokalisierung werden vorgestellt. In Kapitel 3 werden an Beispielen nichtleitender Oxide von Metal-

len mit  $d^0$ -,  $d^8$ - oder  $d^{10}$ -Konfiguration Bandlücken im Zusammenhang mit spektroskopischen Eigenschaften besprochen. Daran anschließend werden die Problematik der Zuordnung von Bindungsenergien in dotierten und undotierten Übergangsmetallociden sowie die Vielfalt der darin auftretenden magnetischen Wechselwirkungen diskutiert. Kapitel 4 behandelt physikalische Effekte in halbleitenden Oxiden wie Eigenschaften der Ladungsträger, Punktdefektmodelle, Bindungsenergie und Spektroskopie von freien und gebundenen Ladungsträgern sowie Übergänge zum metallischen Zustand. Schließlich werden im letzten Kapitel Bandstrukturen, Transporteigenschaften und optische Eigenschaften metallischer Übergangsmetallocide diskutiert. Das Kapitel endet mit einer kurzen Abhandlung über die neuen Hochtemperatursupraleiter und die Probleme, die Supraleitung in diesen Verbindungen zu verstehen.

Insgesamt ist der Versuch begrüßenswert, die Chemie der Übergangsmetallocide von der Seite ihrer physikalischen Eigenschaften her zu betrachten. Die vorgestellten Modelle sind zwar nur kurz angerissen, jedoch wird ihr Verständnis durch zahlreiche aufgenommene Tabellen und Diagramme erleichtert. Der nicht nur oberflächlich interessierte Leser kommt damit aber nicht auf seine Kosten. Auch wer erwartet, daß er in dem Buch einen Eindruck von der Vielfalt der Übergangsmetallocide erhält, wird enttäuscht sein. Bei der behandelten Thematik ist es sicher auch ein Mangel, daß Oxide mit lokalisierten Metall-Metall-Bindungen, z.B. reduzierte Oxomolybdate und Oxoniobate, vernachlässigt wurden.

Trotz aller Kritik kann das Buch demjenigen zur Lektüre empfohlen werden, der sich mit Struktur und Eigenschaften fester Stoffe beschäftigt. Durch zahlreiche Literaturhinweise ermöglicht es einen guten Einstieg in die weiterführende Literatur.

*Jürgen Köhler*  
Max-Planck-Institut für Festkörperforschung  
Stuttgart

**Hydrogen Bonding in Biological Structures.** Von *G. A. Jeffrey* und *W. Saenger*. Springer, Berlin, 1991. XIV, 569 S., geb. 198.00 DM. – ISBN 3-540-50839-2

Wasserstoffbrücken sind in der belebten Welt der Biomoleküle die wichtigsten nichtkovalenten Bindungen. Sie sind maßgeblich an der Bildung biologischer Makromoleküle wie etwa der globulären Proteine und der DNA-Doppelhelix beteiligt, und sie tragen entscheidend zur Enzym-Substrat-Erkennung bei. Dieser Thematik ist die Monographie von G. A. Jeffrey und W. Saenger gewidmet, wobei besonderer Wert auf Geometrien gelegt wird.

Im ersten Teil werden nach einem kurzen geschichtlichen Rückblick die Charakteristika und Funktionen der Wasserstoffbrückenbindung erläutert. Mögliche Geometrien und Auswirkungen auf die Molekülstruktur, Kooperativität, Muster und Statistik werden ebenso besprochen wie die Möglichkeiten der experimentellen und rechnerischen Erfassung.

Im zweiten Teil werden die Muster intra- und intermolekularer Wasserstoffbrücken kleiner Moleküle auf der Basis konkreter Strukturdaten untersucht. Insbesondere werden die Wasserstoffbrücken von Alkoholen und Sacchariden besprochen, die in ihren Kristallstrukturen vielfach ausgedehnte kooperative Netze bilden. Im weiteren wird ausführlich auf die Strukturen von Purinen und Pyrimidinen, deren mögliche Basenpaarungen und auf Kristallstrukturen von Nucleosiden und Nucleotiden eingegangen. Ein kürzerer Abschnitt beschäftigt sich mit den Aminosäuren.

Teil 3 des Buches ist den Wasserstoffbrücken in biologischen Makromolekülen gewidmet. Wesentlich sind hier die Strukturen von Oligosacchariden und Cyclodextrinen, die Aussagen über Kooperativität und Dynamik von größeren Wasserstoffbrückennetzwerken zulassen. Ein weiterer Abschnitt beschäftigt sich mit den internen Wasserstoffbrücken von Proteinen, wobei die beobachteten Geometrien und Muster charakterisiert werden. Anhand von Wasserstoff/Deuterium-Austauschexperimenten wird die Flexibilität von Proteinen und Wasserstoffbrücken beleuchtet. Ebenso werden Nucleinsäuren und deren mögliche Basenpaarungen unter dem Gesichtspunkt der Wasserstoffbrückenbindungen beschrieben. Hier findet sich dann auch ein Abschnitt über Protein-Nucleinsäure-Erkennung.

Im vierten Teil des Buches wird speziell auf Verbände von Wassermolekülen eingegangen. Nach einer Einführung in die Modelle von Wasser, Eis, Clathraten sowie von Hydrat- und Schichthydratverbindungen kleinerer Moleküle wird die Hydratation von Proteinen und Nucleinsäuren besprochen. Eingehend werden die geometrische Anordnung an der Oberfläche dieser Makromoleküle sowie die Bildung von Wasserclustern im Übergang zum Solvens beschrieben.

Insgesamt ist das Buch ein umfassendes Standardwerk zur biologischen Wasserstoffbrückenbindung. Aufgrund der schwierigen Erfassung der Wasserstoffatome bei größeren Strukturen werden allerdings vorwiegend kleine Moleküle wie Saccharide und Nucleinsäurebasen betrachtet, bei denen ausreichende Strukturdaten vorhanden sind. Da Energien von Wasserstoffbrückenbindungen nur schwer zu analysieren sind, werden sie hier kaum berücksichtigt. Dies gilt ebenso für entropische Effekte wie etwa für die Strukturstabilisierung durch Hydratation. Der Leser findet eine Vielzahl konkreter Strukturdaten in schematischen Beispielen und Tabellen, wobei die Diskussion stets durch übersichtliche Graphiken begleitet wird. Fachfremden Lesern wird die Einführung zu den Kapiteln durch ausreichende Information in den Einleitungen erleichtert. Es war gewiß nicht die Absicht der Autoren, ein kurzes Compendium zu schreiben, jedoch wird nicht nur der Spezialist, sondern auch der allgemein interessierte Leser viele nützliche Informationen erhalten, was dem Werk eine breite Leserschaft sichert.

*Ulrich Abele und*

*Georg E. Schulz*

Institut für Organische Chemie und Biochemie  
der Universität Freiburg

**Molecular Modelling für Anwender.** (Reihe: Teubner Studienbücher Chemie.) Von R. W. Kunz. Teubner, Stuttgart, 1991. 243 S., Broschur 29.80 DM. – ISBN 3-519-03511-1

Seit etwa zehn Jahren existieren leistungsfähige (und sehr teure!) Rechenprogramme, mit denen Strukturen von Molekülen, Übermolekülen und Polymeren aufgebaut, optimiert, geändert und nicht zuletzt beeindruckend dargestellt werden können. Im Zuge dieser Entwicklung ist „Molecular Modelling“ zu einem griffigen Modewort geworden, das vor allem in der Pharmaforschung hohe Erwartungen geweckt hat, denn ein Fernziel besteht in der Simulation molekularer Erkennungsprozesse. Daher sind Grundkenntnisse auf diesem Gebiet für jeden Chemiker wünschenswert.

Es ist also sehr zu begrüßen, daß R. W. Kunz mit dem vorliegenden Buch versucht, Prinzipien, Anwendungsbreite und Zuverlässigkeit der verschiedenen Methoden dem interessierten Laien nahezubringen. Das Buch gliedert sich in drei Abschnitte: im ersten werden die „Komponenten des Molecular Modelling“ besprochen, im zweiten „Typische Modelle

und Programme“ vorgestellt und im dritten „Beispiele“ ausführlich diskutiert.

Das erste Kapitel befaßt sich mit den Voraussetzungen für die Berechnung von Struktur und Energie sowie der programmtechnischen Realisierung (zum Beispiel der Benutzeroberfläche). In diesem Zusammenhang werden der Strukturbegriff, die Eigenschaften von Energiehyperflächen, Geometrieoptimierungsmethoden und Strategien zur Konformationssuche in aller Ausführlichkeit behandelt.

Der Eindruck, daß das Buch eher für Experten in Frage kommt, verstärkt sich im zweiten Kapitel, in dem Kraftfeldprogramme (Kraftfelder für kleine und große Moleküle, mathematische Form von Kraftfeldtermen, Parametrisierung) und MO-Programme (Hierarchie der quantenchemischen Methoden, ab-initio-Programme, semiempirische Programme, Berechnung von Struktur- und Reaktivitätsparametern sowie spektroskopischen Daten) mit ihren Vor- und Nachteilen diskutiert werden. Die mathematischen Grundlagen sind nämlich so knapp dargestellt (weitgehend ohne Erläuterung der Symbole), daß sie höchstens als Auffrischung schon vorhandener Kenntnisse dienen können. Zwiespältig ist auch der Nutzen der Wiedergabe von Computerausdrucken: Im Einzelfall kann eine gut kommentierte Ausgabeliste das Verständnis sicherlich fördern. Wenn aber in einem Buch von 250 Seiten mehr als 50 Seiten für den Abdruck von Programm-ein- und -ausgabelisten (MM2, GAMESS, AMPAC/MOPAC) reserviert sind, muß man die Frage nach dem Erkenntnisgewinn klar verneinen – zumal die Mehrzahl der am Molecular Modelling Interessierten wahrscheinlich nie mit solchen Listen konfrontiert werden wird. Dagegen fällt der Abschnitt „Anwendungen von Kraftfeldmethoden“, der für den vorgesehenen Leserkreis besonders wichtig wäre, sehr dürfsig aus; er enthält praktisch nur Hinweise auf Übersichtsartikel!

Das dritte Kapitel entspricht schon eher den Erwartungen. Es behandelt repräsentative Beispiele zur Berechnung von Energien (Bildungswärmen, Solvationsenergien) und Energiedifferenzen, Schwingungsfrequenzen, Strukturen, Molekülorbitalen sowie daraus abgeleiteten Größen wie Atomladungen und Bindungsordnungen. Den Schluß bildet ein kurzes Kapitel über „Klassische Elektronenstruktur versus MO-Resultate“. Alle Beispiele werden kritisch diskutiert und demonstrieren die Leistungsfähigkeit der zuvor besprochenen Methoden. Wie schon in den vorhergehenden Abschnitten erschweren allerdings etliche Schönheitsfehler das Verständnis unnötig. So werden Energien in  $\text{kJ mol}^{-1}$  und  $\text{kcal mol}^{-1}$  angegeben (z.B. auf S. 176), und die Dielektrizitätskonstante wird in zwei nebeneinanderstehenden Formeln stillschweigend durch verschiedene Symbole repräsentiert (S. 91). Etliche Druckfehler (einige davon sinnentstellend) erschweren darüber hinaus das Lesen und Verstehen.

Das Buch hat auch seine starken Seiten. Es enthält eine Fülle aktueller und nützlicher Literaturhinweise, und der Autor hat sich sehr darum bemüht, die Stärken und Schwächen der vorhandenen Methoden vorurteilslos darzustellen und abzuwägen. Wer aber sind die „Adressaten“ dieses Buches? Sind es die wirklichen Programmbenutzer? Sie erwarten wahrscheinlich eine an einigen Stellen ausführlichere Darstellung. Sind es die am Molecular Modelling Interessierten, die vor allem wissen wollen, wann welche Methode einsetzbar ist? Für sie sind manche Passagen aufgrund der Knappheit der Darstellung eine Zumutung, und deswegen ist die ausführliche Wiedergabe von Computerausdrucken um so unverständlich.

Trotz allem kann dieses Buch bedingt empfohlen werden, vor allem weil es eine Marktlücke füllt und preisgünstig ist. Zuguterletzt eine Anmerkung an den Verlag: Trotz schonender Behandlung ging das Rezensionsexemplar nach einmali-