

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-

gem Lesen aus dem Leim. Das sollte auch bei einem Taschenbuch nicht passieren!

Ernst Egert  
Institut für Organische Chemie  
der Universität Frankfurt

### Oligonucleotides and Analogues. A Practical Approach.

(Reihe: The Practical Approach Series.) Herausgegeben von F. Eckstein. Oxford University Press, Oxford, 1991. XIV, 313 S., Broschur 22.50 £. – ISBN 0-19-963279-0.

Seit dem Erscheinen des letzten Buches zu diesem Thema [*Oligonucleotide Synthesis. A Practical Approach.* (Hrsg.: M. Gait), 1984] hat sich die chemische Synthese von Oligonucleotiden und ihren Analoga rasant weiterentwickelt, ohne daß dieser Entwicklung durch zusammenfassende Monographien Rechnung getragen wurde. Das gestiegene Interesse der wissenschaftlichen Welt an Oligonucleotiden als potentiell therapeutisch wirksamen Verbindungen (Antisense-Oligonucleotide, Ribozyme, Aptamere) sowie deren Verwendung in der DNA-Diagnostik verleihen ihrer gezielten Synthese besondere Bedeutung. Mit dem vorliegenden Werk ist es dem Herausgeber in ausgezeichneter Weise gelungen, die bestehende Lücke zu füllen. Es ist zu erwarten, daß sich auch dieses Buch zu einem oft zitierten Standardwerk entwickeln wird.

In zwölf Kapiteln werden dem Leser Theorie und Praxis der Herstellung der Titelverbindungen in Form detaillierter Protokolle vermittelt. Zwar lassen sich unmodifizierte Oligodesoxynucleotide heute, wie im ersten Kapitel beschrieben wird, an kommerziell erwerblichen DNA-Synthesizern relativ problemlos synthetisieren, doch werden selbst bei geringfügigen Variationen im Molekül gänzlich veränderte Strategien notwendig. Damit beschäftigen sich die weiteren Kapitel. Im einzelnen werden hier die Synthesen von Oligoribonucleotiden, 2'-O-Methylribo-Oligonucleotiden und Oligonucleotiden mit modifizierten Basen beschrieben. Als Beispiele für Analoga mit verändertem Phosphat-Rückgrat werden Methylphosphonate, Phosphorothioate und Phosphorodithioate behandelt. Ein weiterer Teil des Buches beschäftigt sich mit der Synthese von Oligonucleotid-Konjugat-Molekülen, z.B. Konjugaten mit chemischen Nucleaseen und nichtradioaktiven Markern. Dergleichen Gruppen lassen sich über das 5'- oder 3'-Ende, über Basen oder über das Phosphat-Rückgrat einführen. Neben den Protokollen für Synthese und Reinigung werden in einigen Fällen auch Anwendungsprotokolle mitgeliefert, so z.B. zur Affinitätsselektion von Proteinen, zur DNA-Sequenzierung, zur DNA-Hybridisierung und zu Antisense-Zellkultur-Experimenten.

Es versteht sich von selbst, daß bei einem so breit gefächerten Thema nicht alle Aspekte behandelt werden können. Eine solche Vollständigkeit wurde vom Herausgeber auch nicht angestrebt. Dennoch hätte sich der Rezensent weitere Kapitel, z.B. über Phosphoramidate und über das Scale-Up der Oligonucleotid-Synthese, gewünscht. Auch die so oft unterschätzten Methoden der Reinigung und der Analytik hätten eigentlich ein eigenes Kapitel verdient. So sind sie, über das Buch verstreut, bei den jeweiligen Substanzklassen zu finden.

Die einzelnen Beiträge wurden von Experten geschrieben, die oftmals selbst die Entwicklung auf dem entsprechenden Gebiet maßgeblich mitbestimmten. Wo es angebracht schien, wurde jedoch auf eine ausführliche Beschreibung eigener Arbeiten zugunsten der Darstellung des „state of the art“ verzichtet, was dem Buch sehr zugute kommt. Ebenso

treten keine Überschneidungen auf; auch dies ist ein Verdienst des Herausgebers.

Das besprochene Buch liegt, der guten Tradition der „Practical Approach Series“ folgend, in einer für ein Viel-Autoren-Buch erstaunlich durchgängigen Aufmachung vor. Inhalts- und Stichwortverzeichnis sind befriedigend, und es wurde sogar an Kleinigkeiten wie etwa einer Liste der Chemikalienlieferanten gedacht. Insgesamt rechtfertigen Inhalt und Ausführung den Preis von 22.50 £. Das Buch wird sich in nicht allzu langer Zeit in den Regalen all der Studenten und Wissenschaftler wiederfinden, die aktives Interesse an der Anwendung von Oligonucleotiden haben.

Anusch Peyman  
Allgemeine Pharmaforschung  
Hoechst AG, Frankfurt am Main

**The Synthesis of Insect Pheromones, 1979–1989.** (Reihe: The Total Synthesis of Natural Products, Vol. 9, Reihenherausgeber: J. ApSimon.) Von K. Mori. Wiley, Chichester, 1992. IX, 534 S., geb. 147.00 \$. – ISBN 0-471-55189-9

Insektenpheromone als verhaltensmodifizierende Naturstoffe sind in den letzten beiden Jahrzehnten durch Biologie, Ökologie und den biologischen Pflanzenschutz in den Mittelpunkt des Interesses vieler Synthesechemiker gerückt. Der vorliegende Band über die Synthese von Insektenpheromonen in den Jahren 1979–1989 wird von einem einzigen Autor, Kenji Mori, bestritten, der in gewandter Manier auf über 500 Seiten die Literatur zur Herstellung dieser Naturstoffe kompiliert und zugleich eine gewaltige Zahl neuer Methoden, Modifikationen und Verbesserungen bekannter Synthesetechniken ausführlich beschreibt. Der Band ist als Fortsetzung zu einem von demselben Autor verfaßten Artikel gedacht, der in Band 4 der Serie „The Total Synthesis of Natural Products“ erschien. Mori ist einer der effektivsten und bekanntesten Pheromonsynthetiker und kann sicherlich als der Guru der Pheromonsynthese, vor allem was die Herstellung chiraler und enantiomerer Verbindungen betrifft, bezeichnet werden. Daher ist es verständlich, daß die Abhandlung enantioselektiver Synthesemethoden einen Großteil des Compendiums ausmacht.

In über 1200 Literaturhinweisen findet sich wohl jeder Pheromonchemiker dieser Epoche wieder, das Literaturverzeichnis umfaßt alle renommierten internationalen und nationalen Journale, wobei aber auch einige Publikationen aus eher seltenen und für den Leser nur schwer zugänglichen Zeitschriften miterfaßt sind. Am meisten beeindrucken jedoch die Formelschemata, die wohl einen erheblichen Anteil der Arbeit dieser Präsentation ausmachen und für deren Auffertigung der Autor auch seinen Mitarbeitern in Tokio ausdrücklich dankt. Fast 1000 (!) Formelschemata machen den Band zu einem Bilderbuch der Pheromonsynthese und zu einem Beispiel besonders anschaulicher Präsentationskunst. Das Buch ist vor allem für die Chemiker, die einen schnellen Überblick über existierende Synthesemethoden für einzelne Pheromonstrukturen suchen und sich vielleicht das eher monotonen Lesen von Synthesebeschreibungen ersparen möchten, eine wertvolle Hilfe.

Dennoch sollte das Buch auch unbedingt sorgfältig gelesen werden. Es bietet nach einer kurzen, fast tabellarischen Aufzählung der wichtigsten Monographien und Reviews der Pheromonforschung jener Zeit eine kurze Einführung über generelle Synthese- und Analysemethoden. Mit Kapitel 3 beginnt der eigentliche Syntheseabschnitt. Die einzelnen Kapitel sind nach strukturchemischen Gesichtspunkten gegliedert, beginnend mit Kohlenwasserstoffen über Alkohole,