

crystals“ (G. Gilli) und „Protein crystallography“ (G. Zanotti). Abgeschlossen wird das Buch mit einer Behandlung von „Physical properties of crystals“ durch M. Catti. Gerade die letzten vier Kapitel, bei denen auch Aspekte der Kristallstrukturlehre behandelt werden, die weit über das bloße Handwerkszeug des Strukturbestimmens hinausgehen, zeigen deutlich, daß die Autoren eingefahrene Wege bei der Darstellung der Materie erfreulicherweise verlassen haben. Daß sie dies außerdem in vorbildlicher Weise getan haben, zeichnet das Buch weiterhin aus, ebenso wie das überaus übersichtliche Layout im Stile der Lehrbücher von Atkins (viele schöne Abbildungen und Diagramme!). Hinzu kommt, daß in allen Kapiteln auch die Behandlung neuester Entwicklungen nicht vernachlässigt wurde, wobei, und auch das muß lobenswert hervorgehoben werden, stets ein ausgeprägter Bezug zur Praxis gewahrt bleibt. So ist das Buch auch für einen erfahrenen Praktiker der Methode eine ausgesprochen lehrreiche Lektüre, zumal die laufende Literatur umfangreich zitiert wird (ca. 850 Zitate!). Einige kleine Einwände: Das zweite Kapitel, „Crystallographic computing“, wirkt etwas deplaziert und wäre wohl besser im Zusammenhang mit „Solution and refinement of crystal structures“ abgehandelt worden, und die Behandlung der Molekulkristalle hätte sicherlich gewonnen, wenn auf die ohnehin sehr elementare Abhandlung der Bindungstheorie verzichtet und statt dessen z. B. der Molekülmechanik breiterer Raum eingeräumt worden wäre. Auch das Register hätte etwas umfangreicher ausfallen können.

Fazit: Ein sicherlich sehr empfehlenswertes Buch, wobei der erstaunlich günstige Preis die Freude noch weiter vergrößert. Aber ist es nur etwas für den Experten? Auch das erfreulicherweise nicht. Gerade durch die Behandlung der mehr chemischen und physikalischen Aspekte von Kristallen und Kristallstrukturen sollte es auch denjenigen, der nur an den Ergebnissen von Kristallstrukturbestimmungen interessiert ist, zu intensiver Lektüre anregen. Wenn dieser dann doch auch einmal einen Blick auf die Methode wirft, um so besser. Auf eines muß sich aber jeder Leser einstellen: Die Autoren machen wenig Konzessionen an diejenigen, die eine Darstellung ohne Mathematik bevorzugen würden.

Gerhard Müller
Fakultät für Chemie
der Universität Konstanz

Molecular Dynamics Simulation. Elementary Methods. Von J. M. Haile. Wiley, Chichester, 1992. XI, 489 S., geb. 47.50 £. – ISBN 0-471-81966-2

Dieses Buch hält, was es im Titel verspricht. Nach einem einführenden Kapitel über die Philosophie der Computersimulation macht es in Kapitel 2 mit der klassischen Dynamik und den Grundlagen der Computersimulation dynamischer Prozesse bekannt. Nächstes Thema ist die Simulation von Systemen aus harten Kugeln (Kapitel 3). Simulationsverfahren für Systeme mit kontinuierlichen Potentialfunktionen werden in den folgenden beiden Kapiteln behandelt: Finite-Differenzen-Methoden und die Simulation von Systemen aus weichen Kugeln. In den letzten beiden Kapiteln werden Methoden zur Bestimmung statischer bzw. dynamischer Eigenschaften eines simulierten Systems diskutiert. Dreizehn Anhänge bieten Material zur Vertiefung, Beispiele für Computerprogramme und andere nützliche Information. Eine Bibliographie gibt Hinweise auf Bücher und Übersichtsartikel zum Thema.

Das Buch ist eine nützliche Bereicherung der Literatur über die Computersimulation atomarer und molekularer Sy-

steme. Es erklärt sorgfältig und praktisch orientiert die Grundlagen moleküldynamischer Simulationen. Da jedes Kapitel eigene Literaturverweise enthält, findet der interessierte Leser leicht Zugang zu weiterführender Literatur. Jedes Kapitel bietet außerdem eine Reihe von Übungen, die weitere Einblicke ermöglichen. Das Buch liest sich leicht und veranschaulicht die Theorie mit graphischen Darstellungen und Ergebnissen von Simulationen, wo immer möglich. Darüber hinaus behandelt es Themen wie die Zuverlässigkeit von Trajektorien und Ergebnissen, Fehlerfortpflanzung, Gleichgewichtseinstellung und andere Probleme, die in anderen Beiträgen häufig zu kurz kommen.

Denjenigen, die ernsthaft an Computertechniken zur dynamischen Simulation interessiert sind, kann ich dieses gelungene und gut geschriebene Buch nur empfehlen.

Wilfred F. van Gunsteren
Laboratorium für Physikalische Chemie
der Eidgenössischen Technischen Hochschule
Zürich (Schweiz)

Synthetic Fluorine Chemistry. Herausgegeben von G. A. Olah, R. D. Chambers und G. K. Surya Prakash. Wiley, New York, 1992. XVII, 402 S., geb. 75.00 £. – ISBN 0-471-54370-5

Fluor zeigt als Element und in seinen Verbindungen Eigenschaften, die so stark von denen der anderen Halogene abweichen, daß sich eine Fluorchemie als eigener Zweig der Chemie mit speziellem methodischen Arsenal entwickelt hat. Dieser Zweig hat heute, 106 Jahre nach der erstmaligen Herstellung von elementarem Fluor, einen solchen Umfang erreicht, daß auch für den Fachmann ein Überblick kaum noch möglich ist. Das vorliegende Buch will auch keine systematische Übersicht geben, vielmehr stellen in 17 Kapiteln führende Wissenschaftler aus Universität und Industrie ausgewählte Gebiete der anorganischen und insbesondere der organischen Fluorchemie umfassend vor. Das Buch beruht auf Beiträgen des Symposiums „Synthetic Fluorine Chemistry“, das vom Loker Hydrocarbon Research Institute der University of Southern California im Februar 1990 organisiert worden war.

Schrobilgen (Kap. 1) beschreibt Herstellung und Lewis-Säure-Verhalten von Edelgasfluorid-Kationen. Christie, Wilson und Schack (Kap. 2) stellen Wege zum Ersatz von Fluor durch Sauerstoff in Fluoriden und Oxyfluoriden vor. Aubke, Cader und Mistry (Kap. 3) geben einen umfassenden Überblick über Übergangsmetallderivate starker Protonensäuren und Supersäuren. Seppelt (Kap. 4) beschreibt Herstellung und Eigenschaften von Verbindungen mit Fluor-stabilisierter Kohlenstoff-Schwefel-Mehrfachbindung. Lagow, Bierschenk, Juhlke und Kawa (Kap. 5) berichten über Perfluoropolyethersynthesen durch Direktfluorierung und potentielle Anwendungsgebiete für diese Verbindungen. Adcock (Kap. 6) beschreibt die Aerosol-Direktfluorierung als universelle Perfluorierungsmethode. Rozen (Kap. 7) stellt elektrophile Fluorierungen organischer Verbindungen mit Fluor und anderen Fluorierungsmitteln vor. Olah und Li (Kap. 8) zeigen den breiten Anwendungsbereich von Oniumpolyhydrogenfluorid-Fluorierungsmitteln. Burton (Kap. 9) beschreibt den Einsatz Perfluoralkyl-haltiger Organometallverbindungen in der fluororganischen Synthese. Prakash (Kap. 10) zeigt nucleophile Perfluoralkylierungen mit Perfluortrialkylsilanen. Farnham (Kap. 11) berichtet über siliciumorganische Reagentien als Synthone in der fluororganischen Chemie. Shteingarts (Kap. 12) beschreibt Syntheseaspekte elektrophiler ipso-Reaktionen von Polyfluorarenen. Takenaka und Lemal

(Kap. 13) diskutieren das Perfluorbenzoxolid-Perfluoroxepin-System. Krespan und Dixon (Kap. 14) stellen die Chemie perhalogener Dioxane und Dioxene vor. Welch, Yamazaki und Gimi (Kap. 15) beschreiben die Fluoracetamid-acetal-Claisen-Umlagerung als Methode für asymmetrische Synthesen biologisch interessanter Verbindungen. Chambers (Kap. 16) berichtet über die Herstellung ungewöhnlicher fluorierter Alkene und Diene durch Fluorid-Ionen-induzierte Reaktionen. Im letzten Kapitel beschreibt Baum Synthesen fluorierter Kondensationsmonomere.

Das Buch gibt in einem thematisch relativ breiten Rahmen einen sehr guten Überblick über den Stand der experimentellen Fluorchemie und bietet hierbei einen bequemen Zugang zur Originalliteratur (ca. 1000 Zitate). Die Nutzung als Nachschlagewerk wird durch ein neunseitiges Stichwortverzeichnis wesentlich unterstützt. Die recht unterschiedliche Darstellungsweise in den verschiedenen Kapiteln, von detaillierter Behandlung weniger Verbindungen bis zur Kurzbeschreibung einer Vielzahl, läßt den Symposiumsursprung erkennen. Für den Leser, der gleich dem Rezensenten das Buch hintereinander liest, z.B. beim Einstieg in die Fluorchemie, erhöht diese Vielfalt die Freude am Lesen.

Stephan Rüdiger
Projektgruppe Fluorchemie
Berlin

Chemistry. The Central Science. 5. Auflage. Von T. L. Brown, H. E. LeMay Jr. und B. E. Bursten. Prentice Hall, Englewood Cliffs, NJ (USA), 1991. XXX, 1045 S., geb. ca. DM 120 – ISBN 0-13-126210-6

Das vorliegende Buch faßt die Grundzüge der Chemie zusammen, wie sie an amerikanischen Hochschulen in den Anfangssemestern gelehrt wird. Es soll den Lehrenden bei der Zusammenstellung eines strukturierten und ausgewogenen Unterrichtskonzepts unterstützen und zugleich dem Lernenden als Begleitmaterial dienen, indem es den in Vorlesungen, Seminaren und Praktika behandelten Stoff auf anschauliche Weise erläutert und ergänzt.

Das nunmehr in fünfter Auflage erschienene Lehrbuch ist in jeder Hinsicht als gelungen zu bezeichnen. Von der ersten Seite an gelingt es den Autoren, die Faszination und Vielfalt ihres Metiers zu vermitteln; zugleich beeindruckt die Sorgfalt und Gründlichkeit bei der Behandlung des Stoffs. Viele farbige Illustrationen tragen wesentlich zum positiven Gesamteindruck bei. Zahlreiche Zusatzinformationen lockern den eigentlichen Lehrstoff auf und ergänzen ihn auf dreierlei Art: Die Abschnitte „Chemistry at Work“ enthalten Anwendungsbeispiele zu den behandelten Themenkreisen, die Abschnitte „A Closer Look“ ermöglichen eine intensivere Auseinandersetzung mit einzelnen Gebieten, wobei auch auf weiterführende Literatur verwiesen wird, und die mit „A Historical Perspective“ überschriebenen, weniger zahlreichen geschichtlichen Exkurse bieten einen Abriss einiger grundlegender Entwicklungen in der Chemie. Zusammen mit dem ansprechenden, farbig gestalteten Layout runden diese Lernhilfen das Ganze ab. Vor allem beim eigentlichen Lehrstoff, dem Kernstück des Buchs, wird deutlich, wie geschickt und überlegt die Autoren vorgegangen sind. Der Stoff ist übersichtlich gegliedert und leicht zu lesen. Der inhaltliche Aufbau ist vorbildlich; es gibt so gut wie nichts daran auszusetzen.

Maßgeblich für die Akzeptanz eines Lehrbuchs bei Dozenten und Studierenden sind gute Übungsbeispiele, und auch in dieser Hinsicht erfüllt das vorliegende Buch die Erwartungen. Eine Vielzahl von Aufgaben am Ende der einzel-

nen Kapitel hilft, das Gelernte zu wiederholen und zu festigen.

Bei der Darstellung physikalischer Zusammenhänge wird durch das vorausgesetzte Maß an mathematischer Vorbildung offensichtlich, wo das Niveau des Lehrbuchs anzusiedeln ist. Mit gängigen Rechenoperationen sollte der Studierende vertraut sein: So werden z.B. bei der Darstellung von pH-Werten Logarithmen verwendet; hierzu und zum Rechnen mit Exponenten gibt es jedoch auch einen nützlichen Anhang. Mit Differenzialrechnung wird nicht gearbeitet, daher ist die Behandlung von Reaktionsgeschwindigkeiten, thermodynamischen Zusammenhängen und der Schrödinger-Gleichung rein beschreibend.

Für Chemiedozenten eignet sich das Buch ausgezeichnet als Standardübersicht über die Grundlagen ihres Fachs; für Studenten in den Anfangssemestern, aber auch für ambitionierte Oberstufenschüler mit Leistungskurs Chemie sei es als Begleitbuch zum Unterrichtsstoff und als Anregung zum Weiterlesen und -lernen empfohlen.

Jennifer Green
Inorganic Chemistry Laboratory
University of Oxford
Oxford (Großbritannien)

Selective Biocatalysis. A Synthetic Approach. Von L. Poppe und L. Novák. VCH Verlagsgesellschaft, Weinheim, 1992. XII, 319 S., geb. 168.00 DM. – ISBN 3-527-28372-2

Biotransformations in Organic Chemistry. Von K. Faber. Springer, Berlin, 1992. IX, 319 S., geb. 128.00 DM. – ISBN 3-540-55762-8

Im Methodenrepertoire der Asymmetrischen Synthese haben sich enzymkatalytische Verfahren dank der hohen Selektivitätsvorteile einen sicheren Stammpfad erobert – als Ergänzung sowie als Konkurrenz zu den etablierten klassisch-chemischen Techniken der Organischen Synthese –, was sich im nahezu exponentiellen Wachstum der Literatur über neue Anwendungen von Enzymen zur Herstellung chiraler Zwischenstufen dokumentiert. Neben fermentativen Techniken profitiert insbesondere die Verwendung isolierter Enzyme vom wachsenden Potential an bis heute bekannten (> 2500) und kommerziell erhältlichen (> 350) Enzymtypen. Die Fülle an einschlägigen Reaktionen zusammenzutragen, einer kritischen Würdigung zu unterziehen und in Buchform als Leitfaden für den präparativ interessierten Synthesechemiker in übersichtlicher Form zu präsentieren ist in mehrfacher Hinsicht ein schwieriges Unterfangen: Einerseits befindet sich das zu porträtierende Forschungsgebiet in einem Status rascher Entwicklung, so daß bei Erscheinen des Druckwerks der Inhalt nicht mehr in allen Aspekten den aktuellen Stand widerspiegelt; andererseits steht das Produkt in Konkurrenz zu einem stetig wachsenden Angebot an spezielleren und im Detail weit kompetenteren Übersichtsartikeln in den einschlägigen Fachzeitschriften, aus denen sich der Synthetiker üblicherweise informiert. Die Autoren der beiden vorliegenden Monographien haben sich dieser Herausforderung gestellt und nahezu zeitgleich Werke gleichen Umfangs produziert, die auch inhaltlich recht ähnlich ausgefallen sind und damit eine vergleichende Beurteilung provozieren.

Beide Bände präsentieren nach einer allgemein-methodischen Einführung den Hauptteil, in dem hierarchisch geordnet enzymatische (und ausgewählte Hefe-vermittelte) Transformationen abgehandelt werden, wobei folgende Unterscheidungsmerkmale hervorzuheben sind: Poppe und Novák lassen der Besprechung verfahrenstypischer Problem-