

Shape in Chemistry. An Introduction to Molecular Shape and Topology. Von P. G. Mezey. VCH Verlagsgesellschaft, Weinheim/VCH Publishers, New York, 1993. 224 S., geb. 124.00 DM/75.00 \$. – ISBN 3-527-27932-60-89573-727-2

Der Begriff der Form wird von Wissenschaftlern aus vielen Bereichen benutzt. Beispielsweise zeichnen Biologen die Form von Mikroorganismen auf, Geologen die von Felsen und Chemiker die von Molekülen. Sie alle verwenden jedoch unterschiedliche Meßmethoden dazu, denn es gibt keine allgemein akzeptierte Definition des Begriffs „Form“. Die meisten Chemiker wenden ihn bei Bedarf an, ohne jemals zu versuchen, ihn in einem tieferen Sinn zu verstehen. In dieser Hinsicht gleicht die Form vielen anderen Begriffen in der Chemie wie dem der Ähnlichkeit oder dem der Struktur, die oft benutzt, aber nie streng definiert werden. Dieses Buch behandelt die Form von Molekülen und insbesondere die Maßnahmen, die zur Quantifizierung dieses Begriffs dienen können. In den letzten beiden Jahrhunderten haben viele hervorragende Wissenschaftler Beiträge zur Untersuchung der Form von Molekülen geleistet. Dieses Thema trat zum ersten Mal in den Vordergrund, als der Begründer der modernen Atomtheorie, John Dalton, 1810 eine Reihe von Molekülmödellen anfertigen ließ. Diese bestanden aus Kugeln und Stäben; Daltons Ziel war, damit die möglichen Formen von einfachen Molekülen darzustellen. Andere bedeutende Forscher auf diesem Gebiet waren Kekulé, der Mitte der 1860er Jahre die hexagonale Struktur von Benzol erkannte, van't Hoff und Le Bel, die 1874 unabhängig voneinander die Vorstellung des tetragonalen Kohlenstoffatoms entwickelten, Fischer, der 1894 ein Schlüssel-Schloß-Modell vorschlug, um die Komplementarität eines Wirkstoffs und seines Rezeptors zu verdeutlichen, Pauling, der in den dreißiger Jahren das Hybridisierungskonzept einföhrte und so die Gestalt vieler Moleküle erklärte, sowie Barton, der 1950 den Begriff der Konformationsanalyse prägte, um seinen Ansatz zur dreidimensionalen Charakterisierung von organischen Molekülen zu beschreiben. Seit den fünfziger Jahren tauchte dann eine Vielzahl von Begriffen zur Beschreibung der Form auf; diese rei-

chen von Amoore zweidimensionalen Silhouetten in den sechziger bis zu Kiers topologischen Indizes in den achtziger Jahren. Im vergangenen Jahrzehnt sind ebenfalls viele neue Ansätze zur Quantifizierung molekularer Formen erdacht worden, auf die an dieser Stelle nicht eingegangen werden kann.

Leider ist nur sehr wenig von dieser vielfältigen Geschichte des Formbegriffs in der Chemie im vorliegenden Buch zu finden. Es enthält nur oberflächliche Hinweise auf einige der heutigen Hauptprobleme auf diesem Gebiet. Ein Beispiel ist der seit einem Dutzend Jahren schwelende Streit darum, ob es überhaupt sinnvoll ist, so kleinen und unscharfen Objekten wie Molekülen eine Form zuzusprechen. Quantentheoretiker wie Primas und Amann in der Schweiz und Woolley in England haben mehrmals darauf hingewiesen, daß isolierte Moleküle keine stabile Form besitzen und daß der Formbegriff nur über die Born-Oppenheimer-Näherung eingeführt werden kann, die die Position der Atomkerne einfriert. Dieses grundlegende Problem hätte sicher in einem Buch angesprochen werden müssen, dessen erklärtes Hauptziel es ist, den Leser davon zu überzeugen, daß die Form von Molekülen rigoros untersucht werden kann. Eine andere Frage, der meiner Meinung nach hätte nachgegangen werden müssen, ist die nach der Abgrenzung zwischen den eindeutig quantentheoretisch zu beschreibenden mikromolekularen und den makromolekularen Objekten, die man besser klassisch-mechanisch beschreibt, z. B. große Kristalle. Obwohl Mezey betont, daß die Form eher eine dynamische als eine statische Eigenschaft ist, und hervorhebt, daß vieles von unserer heutigen Denkweise auf der falschen Vorstellung beruht, die Kerne seien unbeweglich und daher klassisch beschreibbar, sagt er uns nicht, wann dieser klassische Ansatz gültig sein könnte, beispielsweise bei großen Molekülen wie DNS. Er behandelt auch nicht neue Themen wie Kristalle mit oszillierenden Formen, das schwierige Problem der Ableitung dreidimensionaler Strukturen aus ihren zweidimensionalen Abbildung oder die Verwendung neuraler Netze zur Charakterisierung molekularer Formen.

Nach dieser Kritik nun die Vorteile des Buches: Zunächst einige Bemerkungen zum Autor. Mezey hat in der zweiten

Hälfte dieses Jahrhunderts die wichtigsten Beiträge zur Diskussion über die Form von Molekülen geliefert, und es ist daher angebracht, daß er ein Buch über seine Methoden schreibt. Sein Schreibstil ist sehr gut, obwohl Englisch nicht seine Muttersprache ist, und seine Ideen regen stets zum Nachdenken an. Mezey neigt dazu, seine Aussagen in eine mathematische Sprache zu kleiden, die für viele Chemiker vielleicht ungewohnt ist. Dies macht seine Arbeiten für den durchschnittlichen Chemiker schwierig; das vorliegende Buch jedoch ist bewundernswert klar geschrieben und außerordentlich gut lesbar. Es erläutert sehr gut die Methoden, die Mezey in den letzten 20 Jahren zur Analyse molekularer Formen entwickelt hat. Da Mezey meint, daß Moleküle eher topologische als geometrische Objekte sind, wendet er häufig die algebraische Topologie an. In seinen Formgruppen-Methoden beispielsweise, die auf Elektronendichteverteilungs-Diagramme, elektrostatische und van-der-Waals-Potentialhyperflächen angewendet worden sind, werden die Eigenschaften der kontinuierlichen Funktionen, die Konturlinien beschreiben, durch eine Familie von algebraischen Formgruppen dargestellt. Analog dazu behandelt sein Ansatz des quantitativen Form-Aktivität-Zusammenhangs die geometrische Ähnlichkeit von Molekülen als topologische Äquivalenz, die durch Form-Repräsentationen oder -Deskriptoren quantifiziert werden kann. Beide Methoden haben den bedeutenden Vorteil, daß sie auf bewegliche Moleküle angewendet werden können und sich gut für computergestützte Anwendungen eignen. Es scheint auch, daß solche Methoden sich für die Analyse von Form-Ähnlichkeit und -Komplementarität in großen Molekülmassen eignen. Wahrscheinlich werden sich aus Mezeys Ansätzen wichtige und mächtige Werkzeuge für die endlose Suche nach neuen Medikamenten und für den Entwurf neuer Moleküle allgemein entwickeln. Es ist diese vielversprechende Perspektive von Mezeys Arbeit, die es so lohnenswert macht, sich mit ihr zu befassen, und die das vorliegende Buch so anregend wirken läßt.

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