

Proteinen mit chemischen und enzymatische Methoden veranschaulicht. Anhand der Synthese von Glycopeptiden werden schließlich moderne chemoenzymatische Methoden vorgestellt. Weitere Themen des Buches sind allgemeine Grundlagen der Entwicklung von Peptidmimetika, Pseudopeptiden, Protein-Design, Peptidbibliotheken, Diversomere und Peptidpharmaka.

Insgesamt ist das vorliegende Buch didaktisch sehr gut aufgebaut. Die Schemata und Formeln sind klar und übersichtlich. Einige wenige Fehler sind vorhanden, doch mindern sie den Wert des Buches nicht. Die Literaturangaben sind zahlreich und aktuell, das Stichwortverzeichnis ist sehr ausführlich. Besonders wertvoll ist ein lexikalischer Anhang mit Angaben zu über 400 biologisch wichtigen Peptiden, Proteinen und Peptidantibiotika. Das Buch ist jedem Forscher auf dem Gebiet der Peptide wärmstens zu empfehlen.

Athanassios Giannis
Institut für Organische Chemie
der Universität Bonn

Basistext Chemie: Syntheseplanung in der Organischen Chemie. Band 16. Von C. L. Willis und M. Wills. WILEY-VCH, Weinheim. 1997. 91 S., Broschur 19.80 DM.—ISBN 3-527-29404-X.

Band 16 der Reihe „Basistext Chemie“ behandelt „die Kunst der organischen Synthese“ und möchte dem Leser Grundlagen vermitteln, mit deren Hilfe er Strategien für die effiziente Synthese von organischen Verbindungen entwerfen kann. Wie alle Bände der Reihe soll auch dieser den Stoff einer 8–10 stündigen Vorlesung abdecken und nur die wichtigsten Punkte des Themas behandeln.

Die Einführung stellt die Bedeutung der organischen Synthese hervor und geht in einer knappen Wiederholung auf die Polarität von Bindungen und die daraus resultierende Reaktivität organischer Verbindungen ein. Die folgenden drei Kapitel beleuchten die Bedeutung der Bindungspolarität für die Syntheseplanung eingehender und zeigen die Vorgehensweise bei der retrosynthetischen Analyse auf. Kapitel zwei vermittelt die grundlegenden Konzepte anhand der Synthese eines Zielmoleküls mit einer funktionellen Gruppe. In sehr gut verständlicher und übersichtlicher Weise werden die möglichen retrosynthetischen Analysen sowie die daraus resultierenden Synthesen vorgestellt und diskutiert. Kapitel drei führt nun mit der

Erklärung der latenten Polaritäten einen allgemeinen logischen Ansatz für die retrosynthetische Analyse ein. Außerdem werden in extrem knapper Form die Umwandlungen der funktionellen Gruppen behandelt. In Kapitel vier werden schließlich die wichtigsten Punkte, die bei Strategie und Planung einer Synthese zu beachten sind, erörtert.

In den nächsten drei Kapiteln werden Methoden für selektive Synthesen vorgestellt. Kapitel fünf behandelt die Themen Chemoselektivität und Schutzgruppentechnik. Kapitel sechs gibt Beispiele für wichtige regioselektive Reaktionen. Stereospezifische und stereoselektive Reaktionen werden in Kapitel sieben nur kurz angesprochen. Mit dem Verweis auf eine detailliertere Diskussion in der weiterführenden Literatur werden nur die grundlegenden Aspekte der Problematik selektiver Reaktionen dargelegt. Die Beispiele sind jedoch gut gewählt und geben dem Anfänger einen ersten Einblick. Jedes bisher angeführte Kapitel endet mit leichten Übungsbeispielen, die es ermöglichen, das gerade Gelernte zu vertiefen. Kapitel acht behandelt nun alle in den vorhergehenden Kapiteln vorgestellten Aspekte der organischen Synthese anhand dreier Pyrrolizidin-Alkaloide. In erneut sehr anschaulicher Weise werden die retrosynthetische Analyse und die tatsächlich durchgeführte Synthese diskutiert. Der Band endet mit einem Glossar, das noch einmal Definitionen der neu eingeführten Begriffe zusammenstellt.

Mit dem Verzicht auf neue Synthesemethoden wenden sich die Autoren mit ihrem Buch vorwiegend an Studenten mit grundlegenden chemischen Kenntnissen, die etwa dem Vordiplomswissen entsprechen. Dadurch entsteht eine leicht verständliche, didaktisch sehr gut aufgebaute Übersicht über die Konzepte der organischen Synthese, die zusammen mit den Literaturzitaten für jeden interessierten Leser einen guten Einstieg in das Thema gibt.

Roland Grandel
Institut für Organische Chemie
der Universität Heidelberg

Basistext Chemie: Organische Synthese – vom Labor zum Technikum. Band 15. Von S. Lee und G. Robinson. WILEY-VCH, Weinheim. 1997. 86 S., Broschur 19.80 DM.—ISBN 3-527-29403-1

Band 15 der Reihe „Basistext Chemie“ möchte die Problematik der Produktion von organischen Feinchemikalien im

technischen Maßstab sowie Grundlagen und Praxis der Verfahrensentwicklung vorstellen. Wie alle Bände der Reihe ist auch dieser als Einführung in das Thema gedacht und soll den Stoff einer 8- bis 10-stündigen Vorlesung abhandeln. Im ersten Kapitel werden mit dem Hinweis auf fließende Grenzen die Gebiete Forschung und Entwicklung gegenübergestellt. Kapitel zwei zeigt in einer allgemeinen Übersicht – von der Wahl der Reaktionsgefäße über die Reaktionsbedingungen bis zur Isolierung des Produktes – die Punkte, die bei Synthesen im Technikumsmaßstab im Unterschied zu Laborsynthesen zu beachten sind. Kapitel drei stellt die Umwelt- und Genehmigungsaufgaben vor, die von der Industrie zu erfüllen sind.

Die eher trockenen und sehr abstrakt gehaltenen einleitenden Kapitel werden nun durch die folgenden sechs Beispiele für Syntheseverfahren illustriert. Dabei handelt es sich ausschließlich um neue pharmazeutische Wirkstoffe, deren technische Synthesen in den Laboratorien für Verfahrensentwicklung der pharmazeutischen Abteilung bei ICI und später bei Zeneca Pharmaceuticals entwickelt wurden. Die Beschränkung auf Produkte aus nur einem Industriezweig erscheint auf den ersten Blick einseitig. Dennoch werden alle in Kapitel zwei aufgeführten Aspekte des Scale-up einer bekannten Laborsynthese angesprochen. Kapitel vier beschreibt die großtechnische Synthese zweier Cephalosporin-Antibiotika, deren Instabilität eine genaue Einhaltung schonender Reaktionsbedingungen erfordert. Die racemische Synthese von Thromboxan-Antagonisten ist Gegenstand von Kapitel fünf. Eine enantioselektive Synthese via asymmetrischer Evans-Aldolreaktion zeigt Kapitel sechs. Anhand der Synthese eines H₂-Blockers in Kapitel sieben wird sehr anschaulich die Vermeidung explosiver und toxischer Reagentien, die in der „Forschungssynthese“ noch toleriert werden können, geschildert. Die Probleme, die bei dem Versuch entstehen, eine Prostaglandinsynthese nach Corey im Kilogrammaßstab durchzuführen, sowie deren Lösung sind in Kapitel acht nachzulesen. Wie die Ausbeute einer Forschungssynthese durch die großtechnische Synthese sogar noch übertroffen werden kann, vermittelt Kapitel neun über die Herstellung eines Antidiabetikums. Kapitel zehn listet eine Reihe von Reagentien auf, die für großtechnische Arbeiten eingesetzt werden, und diskutiert deren Vor- und Nachteile.

Insgesamt vermittelt dieses Buch einen umfassenden Einblick in die Problematik der technischen Synthese organischer Verbindungen, wobei auf Massenchemikalien

wie Ethylen bewußt nicht eingegangen wurde. Zu bemängeln ist allerdings der völlige Verzicht auf Literaturhinweise.

Christiane Schneider
Institut für Organische Chemie
der Universität Heidelberg

Electronic Conference on Trends in Organic Chemistry, ECTOC 1. Herausgegeben von *H. S. Rzepa, C. Leach* und *J. M. Goodman* Royal Society, Cambridge, 1996. CD-ROM 50.00 £.—ISBN 0-85404-899-5

Es ist soweit: Konferenzen finden ab jetzt virtuell statt. Schluß mit den langen Reisen nach Tokio, Rom oder Jerusalem, um dort mit Fachkollegen neue Ideen zu diskutieren. Dank Internet kann man nun vom Schreibtisch oder gar von zu Hause aus per Laptop an Konferenzen teilnehmen. Ganz so weit ist es natürlich noch nicht, keine Angst. Der Begriff „Electronic Conference“ läßt zwar zunächst auch an solche Folgen der Nutzung neuer Medien denken, doch um es vorweg zu nehmen: Die elektronische Konferenz ist vor allem als Ergänzung und als ideale Dokumentation einer wirklichen Konferenz geeignet.

Für die Zunahme der Zahl elektronischer Konferenzen in den letzten Jahren war vor allem folgender Punkt ausschlaggebend: Das Internet hat sich von einem textorientierten Medium – dazu gehören die klassischen Dienste wie E-Mail, telnet und ftp – zu einem multimedialen Netz (WWW) gewandelt. Gerade in den Naturwissenschaften hat dieser Wandel neue Wege für die Datenverarbeitung eröffnet. Vorträge, Poster und Diskussionen einer Konferenz können nun komplett elektronisch festgehalten und ohne Informationsverlust im HTML-Format (hypertext markup language) transportiert werden. Dreidimensionale Molekülmodelle, in den Text eingebettet, lassen sich am Bildschirm bewegen und frei drehen. Dynamische Prozesse kann man visualisieren, Spektren können gestaucht, ge-

streckt oder sonst wie editiert werden, und so weiter. Das HyperText-Transfer-Protokoll (HTTP) ermöglicht das Laden der Dokumente von beliebigen Rechnern im Internet, und zwar unabhängig vom Betriebssystem oder von der Rechnerplattform. Voraussetzung für all diese Möglichkeiten: Das Plug-in des Client-Browsers „zu Hause“ erkennt die standardisierte Datenstruktur der jeweiligen Anwendung.

Einer der Pioniere auf dem Gebiet der Standardisierung chemischer Information, Dr. Henry S. Rzepa vom Imperial College in London, und zwei Kollegen, Dr. Jonathan M. Goodman vom Department of Chemistry der University of Cambridge sowie Christopher Leach, ebenfalls vom Imperial College, haben in der Zeit vom 12. Juni bis 7. Juli 1995 die erste „Electronic Conference on Trends in Organic Chemistry: ECTOC-1“ organisiert. Eine CD-ROM-Version der Konferenz ist, herausgegeben von der Royal Society of Chemistry (ISBN 0-85404-899-5), erschienen. Die Kongreßbeiträge gliedern sich in 6 Keynote Papers und 71 Artikel, die neuere (Stand: Mitte 1995) Ergebnisse auf den Gebieten der synthetischen, mechanistischen und biologischen Chemie vorstellen. Insgesamt sind Autoren aus 13 Ländern vertreten.

Schon beim Lesen der Keynote Artikel erkennt man die Vorteile der HTML-Sprache. Durch „anklicken“ von wichtigen zweidimensionalen Valenzstrichformeln kommt man zu einer frei drehbaren Visualisierung des Moleküls, was bei komplizierteren Strukturen außerordentlich hilfreich ist. Die 3D-Strukturen sind dabei mit ihren kartesischen Koordinaten im Format der Brookhaven Protein Database (*.pdb files) abgelegt. So kann man sich die zentrale Struktur der Präsentation „A New Synthetic Route to the Illudin and Pterodin Family of Sesquiterpenes“ von Albert Padwa, Erin A. Curtis, Vincent P. Sandanayaka und M. David Weingarten vom Department of Chemistry, Emory University, in Atlanta, von allen Richtungen in vielen verschiedenen Darstellungen (als Drahtmodell, Stäbchenmodell, Stäbchen-Kugel-Modell,

raumfüllend etc.) betrachten. Dieser Struktur liegen die Koordinaten der Röntgenstrukturanalyse einer Vorstufe zum Illudin, die bereits alle fünf Substituenten des späteren Benzolringes in der korrekten Regiochemie trägt, zugrunde. Über die 3D-Präsentation hinaus, und nun zeigt sich die eigentliche Neuerung des HTTP-Ansatzes, lassen sich die Daten editieren. Sobald man die Koordinaten der Röntgenstrukturanalyse lokal auf der eigenen Festplatte gespeichert hat, steht einer Weiterverarbeitung, z. B. Energieberechnungen, nichts im Wege.

Der Beitrag „Studying Perturbation Theory with Explorer EyeChem and VRML“ von Guillermo A. Suner, Omer Casher und Henry S. Rzepa geht in der Visualisierung noch einen Schritt weiter. Die semiempirisch (AM1) berechneten Übergangsstrukturen zahlreicher Diels-Alder-Reaktionen sind in die VRML-Sprache (Virtual Reality Modeling Language) übersetzt worden. Man kann sich somit in den berechneten Übergangsstrukturen bewegen und die Überlappung der Grenzorbitale studieren. Vor allem im didaktischen Bereich eröffnen sich hier ganz neue Perspektiven, im wahrsten Sinne des Wortes.

Die meisten anderen Beiträge beschränken sich auf HTML-Text und Graphiken im GIF-Format. Dabei werden viele Bereiche der Organischen Chemie abgedeckt. Das Spektrum reicht von neuen Naturstoffsynthesen und enantioselektiven Katalysen über die Chemie der Fullere (hier wären pdb-Koordinaten ideal gewesen) bis zu Beiträgen über neue Materialien mit nichtlinear optischen Eigenschaften oder rein theoretischen Studien. Die komplette Liste der Diskussionsbeiträge zu den Präsentationen sowie die Teilnehmerliste (teilweise mit Photographien) runden das Werk ab und machen die CD-ROM zu einer gelungenen Dokumentation. Das klassische „Book of Abstracts“ im Hardcopy-Format wird die nächsten fünf Jahre wohl nicht überleben.

Jörg Grunenberg
Institut für Organische Chemie
der Technischen Universität Braunschweig