

mik-Simulationen. In Kapitel 15 beschäftigt sich D. E. Walters mit der Modellierung von aktiven Zentren von Proteinen anhand der Kenntnis einer Reihe von dort bindenden Liganden. Ein in seiner Arbeitsgruppe entwickeltes Programm wird ausführlich beschrieben. Die letzten drei Kapitel sind dem molekularen Andocken gewidmet. J. Desmet, M. De Maeyer, J. Spriet und I. Lasters stellen ihre Methode zur Beschreibung des flexiblen Andockens von Peptidlängen an Proteine vor, während H. J. Wolfson und R. Nussinov Algorithmen für geometrische Andock-Algorithmen unter besonderer Berücksichtigung ihrer eigenen Methoden zusammenfassen. Im abschließenden Kapitel stellen M. J. E. Sternberg, H. A. Gabb, R. M. Jackson und G. Moont eine in ihren Labors entwickelte Methode zur Vorhersage von Protein-Protein-Bindungen anderen Algorithmen gegenüber.

Wie man es von bekannten Autoren, die über ihr eigenes Forschungsgebiet berichten, erwarten darf, werden die Themen prägnant und umfassend abgehandelt. Im Allgemeinen wird die Anwendung der Programme mit Hilfe von Beispielen erläutert. In einigen Fällen führt der natürliche Ehrgeiz, die Vorteile und Funktionalität der eigenen Methode herauszustellen, dazu, dass alternative Methoden nicht erwähnt und eigene Arbeiten im Übermaß zitiert werden. Dies ist allerdings nicht die Regel. Nur einige kleine Fehler sind mir aufgefallen. Beispielsweise die Verwechslung der Konzepte von Konfigurationsraum und Phasenraum in Kapitel 16, die an den grundlegenden Unterschied zwischen der Vorhersage von Proteinstrukturen und dem Verständnis des Prozesses der Proteinfaltung erinnert. Anhand der zitierten Literatur ist zu erkennen, dass die Originalmanuskripte der einzelnen Kapitel gegen Ende 1997 verfasst wurden. Nur die Kapitel 4 und 5 enthalten einen kurzen Anhang, und in den wenigsten Fällen wurden die Literaturzitate aktualisiert. Diese verspätete Veröffentlichung eines Buchs über ein sich rasch entwickelndes Forschungsgebiet, zu dem in den letzten drei Jahren unzählige Arbeiten veröffentlicht wurden, ist zu bemängeln. So sind seit CASP2 inzwischen zwei neue Runden des CASP-Experiments (Critical Assessment in Structure Prediction) abge-

schlossen worden. Eines der Ergebnisse von CASP3 (1998) war der bemerkenswerte Fortschritt auf dem Gebiet der Ab-initio-Methoden zur Strukturvorhersage. Obwohl die Ausführungen in den einzelnen Kapiteln auch heute noch gültig sind und die dort beschriebenen Programme noch allgemein angewendet werden, wird der Leser wichtige Erkenntnisse der letzten drei Jahre vermissen.

Sieht man von diesem Mangel ab, so ist das Buch aufgrund der reichhaltigen Informationen zu Theorie und vor allem Praxis der Proteinstrukturvorhersage sowohl Neueinsteigern in dieses Gebiet als auch Experten als nützliches Nachschlagewerk zu empfehlen.

Xavier Daura

Laboratorium für Physikalische Chemie
Eidgenössische Technische Hochschule
Zürich (Schweiz)

Principles and Applications of Asymmetric Synthesis. Von Guo-Qiang Lin, Yue-Ming Li und Albert S. C. Chan. John Wiley & Sons Ltd., Chichester 2001. XVII + 515 S., geb. 64.50 £.—ISBN 0-471-40027-0

Das Gebiet der Asymmetrischen Synthese kann wohl guten Gewissens als eines der wichtigsten und umfangreichsten innerhalb der Organischen Chemie bezeichnet werden. In den letzten 30 bis 40 Jahren wurde eine ungeheure Zahl an Methoden entwickelt, zu Beginn in erster Linie stöchiometrische, in den letzten beiden Jahrzehnten in zunehmendem Maße auch katalytische Verfahren. Obwohl gerade in jüngster Vergangenheit einige hervorragende, zum Teil sehr umfangreiche Publikationen auf Teilgebieten der Asymmetrischen Synthese erschienen sind, fehlt doch eine kompakte, schnell überschaubare Zusammenfassung des aktuellen Standes auf diesem äußerst weitläufigen Forschungsfeld. Dieser großen Herausforderung haben sich die Autoren des nun vorliegenden Werkes gestellt.

Das aufgenommene Material deckt die Arbeiten bis September 1999 ab und bietet trotz der rasanten Entwicklungen auf dem behandelten Gebiet

einen aktuellen Überblick. Das Buch richtet sich vor allem an synthethisch arbeitende Wissenschaftler und Studierende, die die Methoden in erster Linie anwenden und einen Einblick in die zur Verfügung stehenden Möglichkeiten erhalten wollen. Dazu haben die Autoren jeden Abschnitt erschöpfend mit Literaturzitaten versehen, was eine weiterführende Beschäftigung mit den Themen sehr vereinfacht.

Das erste, einleitende Kapitel beschäftigt sich mit verschiedenen Themen. Sehr knapp und daher nicht immer besonders anschaulich werden die Chiralität, ihre Formen und deren Nomenklatur abgehandelt. Demgegenüber werden die eher für die Praxis wichtige Bestimmung von Enantiomerenüberschüssen und die Ermittlung der absoluten Konfiguration sehr ausführlich erläutert. Leider ist der anschließende Teil, der sich prinzipiellen Strategien für die Asymmetrische Synthese beschäftigt, eher dürftig.

Die weiteren Kapitel gliedern sich sinnvollerweise nach verschiedenen Reaktionstypen: α -Alkylierung und 1,2-Additionen an Carbonylverbindungen, Aldol- und verwandte Reaktionen, Oxidationen, Diels-Alder- und verwandte Reaktionen sowie Reduktionen. Diese Teilgebiete werden sehr umfassend sowohl in Bezug auf stöchiometrische und auxiliarbasierte Methoden als auch nach katalytischen Ansätzen abgehandelt. Das Hauptaugenmerk liegt dabei nicht so sehr auf der Erläuterung von Feinheiten einer spezifischen Reaktion, sondern hauptsächlich auf der umfassenden Darstellung der gesamten Breite der Möglichkeiten. In knapper, aber präziser Form werden die einzelnen Methoden vorgestellt. Umfangreiche Literaturangaben laden zur tiefer gehenden Beschäftigung mit den Themen ein. Im Prinzip handelt es sich bei den einzelnen Abschnitten um klassische Übersichtsartikel des behandelten Gebietes. Besonders sinnvoll sind die am Ende eines jeden Kapitels aufgeführten Tabellen mit wichtigen und erfolgreich verwendeten Ligandsystemen für katalytische Reaktionen und den dazugehörigen Literaturzitaten.

Das folgende Kapitel über die Anwendung asymmetrischer Reaktionen in der Naturstoffsynthese ist in einem als Nachschlagewerk gedachten Buch le-

der etwas fehl am Platze. Auf gut 50 Seiten werden u.a. die Totalsynthesen von Rifamycin S und Taxol vorgestellt, ohne große retrosynthetische Analysen und strategische Betrachtungen. Es werden lediglich die angewandten Reaktionen dokumentiert. Dies wird einem präparativ arbeitenden Chemiker, der Methoden kennenlernen will, kaum von Nutzen sein.

Ebenso unglücklich ist die Gestaltung des letzten Kapitels, in dem so unterschiedliche Themen wie enzymatische Reaktionen, nichtlineare Effekte und Autokatalyse und Beschreibungen wichtiger, schon 1999 gut ausgearbeiteter Reaktionen wie die asymmetrische 1,4-Addition sehr stiefmütterlich zu einem inhaltlich sehr inhomogenen Kapitel vermenkt werden. Das sich anschließende bescheidene Stichwortverzeichnis lässt leider auch einige Wünsche offen. Wichtige Begriffe wie „Oppolzer-Sultam“, „Oxazolidinon“ oder „BINAP“ sind nicht zu finden.

Das vorliegende Buch bietet einen kompakten und ziemlich umfassenden Überblick über die wichtigsten Bereiche der Asymmetrischen Synthese. Der Praktiker kann sich schnell über mögliche Synthesemethoden informieren. Ein Nachschlagewerk ist es jedoch meines Erachtens nicht; vor allem die Gestaltung der letzten beiden Kapitel spricht dagegen. Um diesem Anspruch gerecht zu werden, wäre auf jeden Fall auch ein ausführlicheres Stichwortverzeichnis nötig gewesen.

Michael Seitz

Institut für Organische Chemie
der Universität Regensburg

Self-Assembly in Supramolecular Systems. Von Leonard F. Lindoy und Ian M. Atkinson. (Reihe: „Monographs in Supramolecular Chemistry“, Hrsg.: J. Fraser Stoddart) Royal Society of Chemistry, Cambridge 2000. X + 224 S., geb. 69.50 £.—ISBN 0-85404-512-0

Um es kurz zu machen: *Self-Assembly in Supramolecular Systems* ist eher eine krude Mixtur von Beispielen aus diesem faszinierenden Gebiet als der von den Autoren im Vorwort versprochene Überblick über die Highlights.

Auf den ersten Blick ist das Inhaltsverzeichnis viel versprechend: Das 1. Kapitel, „Self-Assembly: What Does it Mean?“, scheint philosophisch angehaucht und lässt auf eine genaue Definition hoffen. Leider wird aber keine Unterscheidung der beiden Begriffe „self-assembly“ und „self-organization“ vorgenommen; ebenso fehlen brauchbare Einführungen in so zentrale Themen wie Präorganisation, Templat oder Kooperativität, obgleich diese Begriffe im folgenden Text verwendet werden. Schließlich wäre eine präzise Diskussion der Begriffe Entropie (nur einmal im Index aufgeführt) und Enthalpie wertvoll gewesen.

Demgegenüber ist das 2. Kapitel mit seiner kurzen, aber informativen Einführung in die verschiedenen Typen intermolekularer Kräfte sicher für alle lesenswert, die sich einen raschen Überblick verschaffen wollen. Im Hinblick auf die umfangreiche Diskussion metallhaltiger Systeme in den beiden letzten Kapiteln vermisste ich Angaben zu Metall-Ligand-Bindungen, die einen Vergleich ihrer Bindungsenergie und ihrer geometrischen Möglichkeiten mit denen anderer Wechselwirkungen erlaubten würde.

Leider verlassen die Autoren ihr logisches Konzept ab dem 3. Kapitel, „Hydrogen-Bonded and π -Stacked Systems“, das sich auf den Typ der Wechselwirkung bezieht, während die Kapitel 4, „Rotaxanes“, und 5, „Catenanes“, auf einer Ordnung gemäß der Topologie basieren, und im 6. Kapitel, „Metal-Directed Synthesis“, synthetische Aspekte behandelt werden. Einige der prominentesten Beispiele für das letztgenannte Konzept, nämlich Fujitas, Stangs und Raymonds Metallomacrocyclen und Kapseln, rutschen in das letzte Kapitel, dessen Titel „Further Metal-Containing Systems“ sie der generellen Unwichtigkeit eines jeden „Sonsiges“-Kapitels aus liefert. Die Unterscheidung zwischen wasserstoffverbrückten und π -gebundenen Aggregaten in Kapitel 3 ist ähnlich inkonsistent: Selbstreplizierende Systeme, also ein Funktionskriterium, stehen am Ende einer strukturbasierten Gliederung in einfache, cyclische, zylindrische und kugelförmige Aggregate und würden besser in das nur einen Abschnitt lange Unterkapitel 3.2.2, „Molecular Assem-

bly as Reaction Template“, passen. In dem nur die älteren Arbeiten von Rebek erwähnt werden, werden nicht nur die künstlichen Minimalreplikatoren der Kiedrowski-Gruppe ausser Acht gelassen, sondern auch Ghadiris selbstreplizierende Peptide und Orgels bahnbrechende Ideen.

Im 3. Kapitel kommen zudem einige ärgerliche Fehler vor: Die Rebek-Kapseln 28 und 31 (Seite 38 und 40) sind identisch mit Ausnahme der die Löslichkeit vermittelnden Seitenketten, die aber nur von geringer Bedeutung für die Komplexbildung sind. Eine ähnlich unnötige Verdopplung findet sich für die Softbälle 30 und 33b: Wie man an den Computermodellen sehen kann, repräsentieren beide Strukturen das gleiche Molekül — dargestellt in zwei verschiedenen Formeln, die durch fehlende Doppelbindungen und Stickstoffatome jedoch beide falsch sind. Es ist mir absolut unverständlich, warum die beiden zugehörigen MM2-optimierten Strukturen sich überhaupt unterscheiden. Sicher sind aber die Längen der Wasserstoffbrücken in 33 jenseits eines vernünftigen Abstands. Der Text enthält ebenso Wiederholungen im Softball-Abschnitt und hinterlässt den Eindruck einer gewissen Lieblosigkeit bei der Vorbereitung des Buchs.

Mechanisch gebundene Moleküle wie Rotaxane, Catenane und Knoten sind diffus über die Stoddart-lastigen Kapitel 4 und 5 sowie die Abschnitte 6.2 und 6.7 verteilt. Eine konsequente Gliederung nach den zu ihrer Synthese eingesetzten Templateffekten und eine Zusammenführung typverwandter Rotaxane und Catenane wäre vorteilhafter gewesen und hätte Wiederholungen vermieden, sodass mehr Platz für eine detailliertere Diskussion gewesen wäre.

Die Autoren hoffen, eine breite Leserschaft zu finden: vom fortgeschrittenen Studenten über den Novizen in diesem Forschungsgebiet bis hin zum erfahrenen Chemiker in der supramolekularen Chemie. Scheinbar leicht zu lesen, verlangt das Buch dennoch zu viel implizites Verständnis von Studierenden, sodass das Wissen entweder schwer zu erlangen ist oder notwendigerweise in einer oberflächlichen Sichtweise auf die präsentierte, hochinteressante Chemie endet. Der Neuling mag die vielen Referenzen nützlich finden, die jedoch