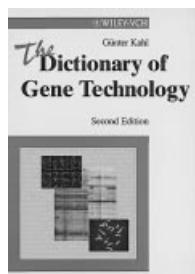


## Lernen, Lehren, Lust

**Dictionary of Gene Technology.** 2. Auflage. Von *Günther Kahl*. Wiley-VCH, Weinheim 2001. XV + 941 S. geb. 159.00 €.—ISBN 3-527-30100-3

Um es gleich vorwegzunehmen: Dieses Buch sollte sich griffbereit in der Nähe eines jeden befinden, der sich lernend, lehrend, lustvoll mit Molekularbiologie und Gentechnologie beschäftigt – und nicht nur auf dem Nachttisch derer, die sich angewöhnt haben, Lexika zum besseren Einschlafen zu lesen.

Günther Kahl hat mit der aktuellen, zweiten Ausgabe ein Nachschlagewerk vorgelegt, in dem wohl nur sehr wenige Abkürzungen, deren Zahl gerade in diesem Fachgebiet dramatisch zunimmt, nicht erklärt werden. Sein Buch ist ein Wörterbuch im besten Sinne – kein Lexikon, in dem man beispielsweise auch Namen und historische Zusammenhänge erfahren kann. Vielmehr wird man dieses Werk konsultieren, um einen Begriff oder das Prinzip einer Reaktion oder Technik nachzuschlagen und zu verstehen, ohne gleich ein Lehrbuchkapitel oder mehrere Originalpublikationen durchzuarbeiten: Mehr als 6500 Einträge mit teilweise ausführlichen Erklärungen, die durch zahlreiche, visuell sehr gut erfassbare Abbildungen ergänzt sind, vermitteln



einen umfassenden Wortschatz auf dem Gebiet der Gentechnologie.

Aber was alles ist Gentechnologie? Der Autor gibt die Antwort mit einem Querverweis auf den Eintrag „genetic engineering“: Es ist eine In-vitro-Methodologie zur Veränderung der Struktur, zum Design von Genen und zur Konstruktion chimärer Gene. Diese Technologie beinhaltet sowohl den Transfer von Genen in verschiedene Organismen als auch die Expression von Genen innerhalb eines neuen genetischen Kontexts. Gentechnologie ist die methodische Grundlage für die Erforschung der Struktur und Regulation von Genen, aber auch die Voraussetzung für weitreichende industrielle Anwendungen, z.B. die Optimierung biotechnologisch nützlicher Organismen hinsichtlich ihrer Qualitäten in der Produktion von Chemikalien oder Pharmaka.

In diesem Sinne enthält das vorliegende Wörterbuch Einträge, die nicht nur die genetischen und molekularbiologischen Grundlagen der Gentechnologie widerspiegeln, sondern auch eine umfassende Sammlung von Stichworten, die im Zusammenhang mit der praktischen Umsetzung dieses Wissens in eine Technologie stehen. Ein dichtes Netz von Querverweisen erleichtert das Auffinden einer gewünschten Erklärung, denn nicht immer ist der im Laborjargon übliche Begriff als Stichwort verzeichnet (z.B. „error-prone-PCR“: Man findet stattdessen aber schnell „Polymerase chain reaction mutagenesis (PCR mutagenesis)“).

Aktuellen Entwicklungen der Forschung wird in erfreulichem Maße Rechnung getragen (Beispiele: „DNA chip technology“, „Gene library“, „Nanotechnology“, „Single molecule sequencing“) – zentrale Begriffe der gegenwärtig heißen öffentlichen Debatte über die Gentechnologie und ihre neuen Möglichkeiten, z.B. das Thema „embryonale Stammzellen“ findet man aber noch

nicht; es wird also wohl eine weitere Ausgabe dieses Werkes geben müssen!

Positiv fällt beim weiteren Durchstöbern des Buchs nicht nur die Praxisnähe des Autors auf, dem auch Einträge wie „Eppendorf“, „Falcon plastic ware“, „Millipore filters“, „Mini-prep“, „Qia-gene columns“ oder „Parafilm“ nennenswert erschienen. Selbst der Anhang dieses Werkes ist noch mit Liebe zum Detail und mit der Laborarbeit im Blick gestaltet worden: Hier sei stellvertretend die umfangreiche Zusammenstellung aller in der Gentechnologie relevanten Datenbanken genannt, die ein „Muss“ bei der Recherche nach Genen, Proteinen und Strukturen sind. Günther Kahl ist aber bei aller Arbeit auch der Humor nicht abhanden gekommen: In guter Tradition eines gewissen Redakteurs, der das legendäre Stichwort „Steinlaus (*Petrophagus lorioti*)“ in den *Pschyrembel* einschleuste, versteckte er (mindestens) drei Scherzeinträge, von denen zumindest einer die ungläubige Rezensentin zu sofortiger Recherche im Internet veranlasste (sie kennt jetzt vermutlich die Motivation dieses Eintrags) – Finderlohn gibt es für die erste richtige Rückmeldung!

Susanne Brakmann  
Angewandte Molekulare Evolution  
Institut für Zoologie  
Leipzig

**Computational Organometallic Chemistry.** Von *Thomas R. Cundari*. Marcel Dekker Inc., New York 2001. 428 S., geb. 185.00 \$—ISBN 0-8247-0478-9

Um es gleich vorwegzunehmen: Das Buch ist eine sehr gelungene Zusammenstellung verschiedener Forschungsgebiete angesehener Gruppen zum Computereinsatz in der metallorganischen Chemie, und ich stimme T. Cundari zu, der in der Einleitung schreibt: „the time was ripe for a book on

Diese Rubrik enthält Buchbesprechungen und Hinweise auf neue Bücher. Buchbesprechungen werden auf Einladung der Redaktion geschrieben. Vorschläge für zu besprechende Bücher und für Rezessenten sind willkommen. Verlage sollten Buchankündigungen oder (besser) Bücher an die Redaktion Angewandte Chemie, Postfach 101161, D-69451 Weinheim, Bundesrepublik Deutschland senden. Die Redaktion behält sich bei der Besprechung von Büchern, die unverlangt zur Rezension eingehen, eine Auswahl vor. Nicht rezensierte Bücher werden nicht zurückgesandt.

computational organometallic chemistry". Das vorliegende Werk gibt einen guten Überblick über die Vielfalt der Methoden und die jeweiligen Vorteile, aber auch einen Einblick in die Probleme, die noch gelöst werden müssen.

In den letzten Jahren hat sich der Einsatz von Rechenmethoden auch im Bereich der metallorganischen Chemie immer mehr etabliert. Dies liegt natürlich zum einen an der extrem gestiegenen Rechenleistung: Heutzutage können mit Personalcomputern mit einem sehr guten Preis-Leistungs-Verhältnis auch aufwändigste Rechnungen durchgeführt werden. Zum anderen ist dies aber auch in den Arbeiten vieler Gruppen weltweit begründet, die zeigen konnten, dass die Theorie wichtige Beiträge zum Verständnis der Experimente liefern kann. Im Bereich der metallorganischen Chemie ist hier natürlich besonders die Dichtefunktionaltheorie zu nennen. Dies drückt sich nicht zuletzt auch in der Verleihung des Nobel-Preises für Chemie 1998 aus: „an Walter Kohn für die Entwicklung der Dichtefunktionaltheorie und an John Pople für die Entwicklung quantenchemischer Berechnungsmethoden“.

Dem Chemiker, der auf dem Gebiet der metallorganischen Chemie arbeitet, stehen viele verschiedene Möglichkeiten offen, durch Rechnungen zusätzliche Informationen für seine Forschung zu gewinnen. Dies kommt in den verschiedenen Themen zum Ausdruck, die in den 15 Kapiteln des Buchs behandelt werden. Alle Beiträge liefern in den Literaturverzeichnissen Hinweise auf aktuelle Sekundärliteratur.

Per-Ola Norrby stellt im ersten Kapitel sein „Rezept für ein organometallics Kraftfeld“ vor, das er bereits mehrfach sehr erfolgreich eingesetzt hat. Sein Beitrag erklärt den grundsätzlichen Aufbau und Unterschiede zwischen verschiedenen Kraftfeldern sowie Verfahren zu deren Parametrisierung. Die automatische Generierung von Kraftfeldern, Optimierungsmethoden wie Simplex und Newton-Raphson, Validierungsmethoden, aber auch häufig auftretende Probleme werden angesprochen. Anhand von drei Beispielen wird die erfolgreiche Anwendung des „Kochrezeptes“ gezeigt.

Im zweiten Kapitel beschreibt David White, wie sterische Einflüsse quantita-

tiv erfasst werden können, sowohl mit Hilfe von Molekülmechanikprogrammen (Allinger: MM2, MM3, MM4) als auch durch mathematische Beschreibungen („Cone angles“ und „solid angles“). Davon ist dem Chemiker sicher Tolmans „Cone Angle“ am geläufigsten, der oft als Maß für die Raumerfüllung von Liganden um ein Metallzentrum benutzt wird.

Zur Einschätzung der Leistungsfähigkeit moderner Methoden trägt der Beitrag von Diedenhofen, Wagener und Frenking bei, der sich mit der Genauigkeit quantenchemischer Methoden beschäftigt. Man erhält einen schönen Überblick über die bekanntesten quantenchemischen Programme und die Vorteile und Nachteile der DFT-Methoden. Die Bedeutung der Austausch- und Korrelationsfunktionale, der ECP's sowie relativistischer Effekte im Bereich der Übergangsmetalle wird erklärt, und eine umfangreiche Literaturzitatsammlung regt zur tiefer gehenden Beschäftigung mit der Thematik an. Am Beispiel von Carbonylkomplexen wird der Einfluss der Wahl der Methode auf verschiedene experimentelle Observablen wie Bindungslängen, Dissoziationsenergien oder Stretschwingungen diskutiert. Weitere Beispiele betreffen Nitridokomplexe und übergangsmetallkatalysierte Prozesse wie das Wassergas-Gleichgewicht oder die Oxidation/Epoxydation von Olefinen. Ein separates Kapitel ist der Berechnung von NMR-chemischen Verschiebungen gewidmet, das für Experimentatoren von besonderem Interesse sein dürfte. Der Beitrag zeigt, dass die Begründung des Nobel-Komitees 1998 („Chemie ist keine rein experimentelle Wissenschaft mehr“) auch im Bereich der metallorganischen Chemie stimmt!

Über den Einsatz von Multireferenzmethoden berichtet Kristine Pierloot in ihrem Beitrag zur Bedeutung von nicht-dynamischer Korrelation in Übergangsmetallkomplexen. Die schwierige Wahl der richtigen Referenzwellenfunktion und der aktiven Orbitale in der CASSCF- oder CASPT2-Rechnung erfordert allerdings erweiterte Kenntnisse. Die Autorin versucht, dem Leser Richtlinien für die Anwendung an die Hand zu geben, spricht aber auch offen die Einschränkungen an, die zu beachten sind.

Mit der Anwendung von QM/MM-Methoden wird versucht, die Vorteile der Molekülmechanik (Geschwindigkeit, Atomanzahl) mit denen der QM-Methoden (Genauigkeit) zu verbinden. Das Molekül wird in verschiedene Regionen aufgeteilt, die mit unterschiedlichen Methoden behandelt werden können. Der Beitrag von F. Maseras beschreibt den Einsatz einer solchen Methode an drei Beispielen: (i) der Untersuchung agostischer Wechselwirkungen in  $\text{Ir}(\text{H})_2(\text{PR}_3)_3$ -Komplexen, (ii) an Porphyrinen und (iii) zur Untersuchung sterischer Effekte bei der asymmetrischen Dihydroxylierung.

Das Docking von Inhibitormolekülen an die Metallionen des aktiven Zentrums einer HIV-Integrase wird von A. Jolly et al. beschrieben. Semiempirische ZINDO-Rechnungen stehen im Mittelpunkt der beiden folgenden Artikel. Zhang et al. zeigen, dass durch die Berechnung verschiedener Diene aussichtsreiche Kandidaten für die Cyclometallierung von Dienen ermittelt werden konnten, während sich der Beitrag von Taber et al. mit katalytischen Reaktionen, insbesondere der Entwicklung und Anwendung eines Modells sowie des Studiums des Einflusses chiraler Auxiliare auf die Rhodium-vermittelte C-H-Insertionsreaktion befasst. Bei enantioselektiven Reaktionen entscheidet sich der erzielte *ee*-Wert im Übergangszustand, der daher für die Optimierung der jeweiligen Reaktion von entscheidender Bedeutung ist.

Die Qualität von Kraftfeldrechnungen hängt stark von den Parametern ab. Diese sind für organische Moleküle wesentlich einfacher zu bestimmen als für metallorganische Verbindungen, die sich durch eine größere Koordinationsvielfalt auszeichnen. Daher wurden gezielt Parametrisierungen für spezielle Probleme durchgeführt. Im Kapitel „Molecular Mechanics Modeling of Organometallic Catalysts“ geben D. P. White und W. Douglass einen umfassenden Überblick über bisherige Arbeiten im Bereich der Katalyse. Ein ausführliches Literaturverzeichnis hinsichtlich verschiedener Parametrisierungen ist ebenfalls vorhanden.

Titanverbindungen, die ja bei vielen katalytischen Verfahren wie der Hydroisilylierung und den Ziegler-Natta-Verfahren eine wichtige Rolle spielen, ste-

hen im Vordergrund des Beitrags von M. S. Gordon et al. Diese Verbindungen zeigen oft ungewöhnliche Koordinationsumgebungen, was die Berechnung oft sehr aufwändig macht und die Anwendung von Multireferenzmethoden erfordert. Dies wird an verschiedenen Beispielen ( $TiX_2$ ,  $Ti_2H_6$ ,  $Ti_2H_8$ ,  $H_2Ti=EH_2$ ) demonstriert.

Der Beitrag von J. N. Harvey macht auf ein besonderes Problem der metallorganischen Computerchemie aufmerksam, nämlich auf die verschiedenen zu berücksichtigenden Spinzustände. Am Beispiel von „Spin-Forbidden Reactions“ zeigt Harvey, wie ein Wechsel der Potentialhyperfläche während der Reaktion untersucht werden kann. Er stellt in verschiedenen Beispielen mehrere Möglichkeiten vor, wie die Punkte lokalisiert werden können, an denen der Übertritt von der einen zur anderen Potentialfläche erfolgt.

K. Krogh-Jespersen et al. vergleichen die Ergebnisse von Dichtefunktionalmethoden mit MP2-Rechnungen für die oxidative Addition von Wasserstoff an  $M(PH_3)_2Cl$  ( $M = Rh, Ir$ ). Auch sie kommen zu dem Ergebnis, dass die Dichtefunktionalmethoden den besten Kompromiss zwischen Genauigkeit und Rechenaufwand darstellen. Relativistische Effekte stehen im Mittelpunkt des Beitrags von B. Bursten. Am Beispiel von Actinidenkomplexen werden die besonderen Herausforderungen hervorgehoben, die die Berechnung dieser Verbindungen mit sich bringt. Gerade die dynamische Korrelation und die große Anzahl von annährend energiegleichen 5f- und 6d-Orbitalen bringt einen großen Rechenaufwand mit sich, der mit relativistischen DFT-Rechnungen (insbesondere PW91) gut gelöst werden kann. T. P. Hamilton berichtet über Doppelbindungen zwischen Elementen der Gruppen 13 und 15, die allgemein als  $H_2M=EH_2$  dargestellt werden können. Verbindungen von  $H_2B=NH_2$  bis  $H_2Ga=AsH_2$  werden mit verschiedenen Ab-initio-Methoden (HF, MP2, CCSD(T)) beschrieben.

Das letzte Kapitel ist den Metallocenen gewidmet. Sowohl  $Cp_2E$ - als auch  $CpE$ -Strukturen mit Hauptgruppenelementen der Gruppen 1, 2, 13 und 14 werden in unterschiedlichen Geometrien und unter Betrachtung verschiedener Haptizitäten untersucht. Die Vor-

und Nachteile semiempirischer, Ab-initio- und Dichtefunktionalmethoden werden zusammen mit Populationsanalysen, Verschiebungsrechnungen und Ligandeneffekten an verschiedenen Beispielen diskutiert. Der Beitrag geht auch auf Details ein, die bei der Erstellung der Inputs in Hinsicht auf Symmetrien und theoretisches Niveau zu beachten sind.

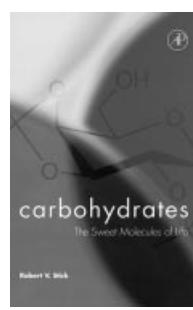
Das vorliegende Buch vermittelt einen Eindruck davon, in welchen Forschungsgebieten der metallorganischen Chemie Computer-Hilfestellungen leisten können. Speziell die in den Vordergrund gestellte Diversität der Beiträge spricht einen breiten Leserkreis an. Jedoch sollte der versprochene „how-to-approach“ nicht zu wörtlich genommen werden, das Buch ist keine Anleitung zur Bedienung der Programme. Es ist sehr schwer, den Bereich „Computational Organometallic Chemistry“ umfassend darzustellen, es sollte aber nicht unerwähnt bleiben, dass einige Themen fehlen: Ich habe einen Beitrag zu Ab-initio-Moleküldynamikrechnungen, zu Clustermethoden und einen separaten Beitrag zur Berechnung von „properties“ vermisst. Gerade die Berechnung von Moleküleigenschaften ist für viele experimentell tätige Chemiker das zentrale Anliegen!

Thomas Straßner

Institut für Anorganische Chemie  
der Technischen Universität München

**Carbohydrates. The Sweet Molecules of Life.** Von Robert V. Stick. Academic Press, London 2001. 265 S., geb. 64.95 \$.—ISBN 0-12-670960-2

Das vorliegende Buch ist ein weiteres in der Reihe von Büchern über Kohlenhydratchemie, die in den letzten Jahren erschienen sind. Es behandelt in recht konzentrierter Form die wichtigsten Aspekte moderner Kohlenhydratchemie, wobei der Autor sein Hauptaugenmerk auf die Synthese von Zuckern und Sacchariden rich-



tet. Im Klappentext wird das Buch für alle, die sich für die Chemie der Kohlenhydrate interessieren, empfohlen, insbesondere auch für fortgeschrittene Studierende.

Der Autor beschreibt auf 256 Seiten alle wichtigen Bereiche der Kohlenhydratchemie in übersichtlicher Weise. Nach einer schönen Einführung in die Geschichte der Kohlenhydrate mit der Schilderung der erstaunlichen Leistungen Emil Fischers werden wichtige Begriffe wie Konformation und anomerer Effekt anschaulich erläutert. Es folgt ein gelungenes Kapitel über in der Kohlenhydratchemie verwendete Schutzgruppen, das dem Leser einen guten Einblick in die spezielle Problematik der Schutzgruppentechniken bei Zuckern gibt. In zwei weiteren Kapiteln, deren Aufbau sich im Wesentlichen an den am Markt vorhandenen Büchern orientiert, werden zunächst auf 44 Seiten die Reaktionen von Monosacchariden und anschließend auf 64 Seiten Glycosylierungen und der Aufbau der O-glycosidischen Bindung behandelt. Besonders im letzten Kapitel werden in hervorragender Weise alle neueren Entwicklungen vorgestellt. Die letzten vier Kapitel, die sich mit der Oligosaccharidsynthese (einschließlich neuer Festphasen- und enzymatische Synthesen), Disacchariden, Oligo- und Polysacchariden sowie Glycokonjugaten und Kohlenhydratimpfstoffen beschäftigen, sind sehr knapp abgefasst, sodass zum Verständnis der Themen andere Bücher herangezogen werden müssen. Insbesondere die biologischen Aspekte von Kohlenhydraten sind doch recht oberflächlich dargestellt, und etwas mehr Substanz wäre wünschenswert gewesen.

Jedes Kapitel schließt mit einem kurzen Literaturverzeichnis, das die wichtigsten Arbeiten auf dem jeweiligen Teilgebiet zusammenfasst. Am Ende des Buchs findet sich ein Anhang, in dem auf die Nomenklatur von Zuckern (als Verweis auf die entsprechende Literatur) eingegangen wird, und eine Übersicht über die wichtigsten Zeitschriften und Monographien zum Thema Kohlenhydrate. Das Stichwortverzeichnis ist sehr gründlich und ermöglicht ein schnelles Auffinden der gesuchten Begriffe. Sehr gelungen sind die Formelschemata in diesem Buch, die mit außerordentlicher Sorgfalt ge-