

teln zur Natur und zur Bildung von Radikationen werden in den Kapiteln 3 und 4 Grundlagen der Reaktivität von Radikationen und mechanistische Details ihrer Reaktionen besprochen. In zwei weiteren Kapiteln steht die Synthesechemie im Mittelpunkt, wobei Strategien zur Optimierung von Radikationenreaktionen und interessante Beispiele aus der Synthesechemie diskutiert werden. In einem eher kurzen Kapitel werden anschließend praktische Anwendungen von organischen Radikationen vorgestellt, bevor in einem Schlusskapitel wichtige zukünftige Forschungsbereiche erörtert werden.

Bedauerlicherweise begibt man sich beim Lesen dieses Werks auf eine didaktische und inhaltliche Achterbahnfahrt, denn zu sehr folgt der Autor seinen Neigungen und Spezialkenntnissen statt einem didaktischen Konzept. So springt er in seinen Ausführungen detailverliebt von Beispiel zu Beispiel, ohne erkennbaren Leitmotiven nachzugehen, wobei recht unvermittelt allgemein wichtige Erkenntnisse, die man zweckmäßigerweise in einer Einführung hätte zusammenfassen sollen, isoliert auftauchen. Folglich lässt dieses Buch eine klare Struktur sowie eine objektive, prägnante und tief reichende Systematisierung des Materials weitestgehend vermissen. Als Anschauungsmaterial mag bereits die „Ouverture“ im Abschnitt 1.1 dienen, die höchst unglücklich mit dem „One-Electron-Shift“-Konzept von Pross, das nun wirklich gar nichts mit der Radikationenchemie zu tun hat, beginnt. Auch in der Folge prägen isolierte Aussagen sowie die Vermengung von Unwichtigem mit Wichtigem die Stoffvermittlung so stark, dass das gesamte Werk darunter leidet. Selbst in großen Zusammenhängen agiert der Autor unglücklich: In Kapitel 3 zur Reaktivität von Radikationen werden fast ausschließlich strukturelle Aspekte, aber eben nicht die Reaktivität dieser Spezies diskutiert. Die Ausführungen in Kapitel 4 zur mechanistischen Unterscheidung von Radikationen-Mechanismen kommen ohne die Marcus-Theorie zum Elektronentransfer aus, die übrigens im gesamten Buch nicht erwähnt wird. Die seit mehreren Jahrzehnten wohl bekannte $S_{RN}1$ -Reaktion wird im Kapitel „Concluding Remarks“ ausgiebig besprochen. Dane-

ben liegt auch in der fachlichen Präzision leider Vieles im Argen. So wird beispielsweise Cycloaddition mit Cyclisierung oder mit Kondensation gleichgesetzt (Seite 319 ff.). Anstelle von \rightleftharpoons wird \rightleftharpoons als Symbol für das chemische Gleichgewichtszeichen verwendet, und in der Literatur bereits widerlegte Beispiele werden ungeprüft übernommen.

Auch das Stichwortverzeichnis ist zu bemängeln, denn mit vier Seiten Umfang wird es der Vielfalt der behandelten Themen nicht gerecht. Zudem ist es seltsam unausgewogen: Wichtige zentrale Begriffe wie Marcus-Theorie, Elektronenaffinität, Ionisierungspotential (bzw. Ionisierungsenergie), Rehm-Weller-Gleichung und photoinduzierter Elektronentransfer sind nicht auffindbar, während z.B. unter dem Stichwort „chalcogenides“ auf mehr als fünfzig Seiten verwiesen wird.

Das Buch kann eigentlich nur dem schon in der Radikationenchemie Kundigen empfohlen werden, dem diese Beispielsammlung und spezielle Aufbereitung des Stoffes auch wertvolle Hinweise bieten kann. Für Studierende hingegen, die sich erstmalig in diese Materie einarbeiten möchten, ist dieses Werk gänzlich ungeeignet.

Michael Schmittell
Institut für Organische Chemie I
Universität Siegen

Drug Design



Cutting Edge Approaches. Herausgegeben von Darren R. Flower. Royal Society of Chemistry, Cambridge 2002. X + 192 S., geb. 59.50 £.—ISBN 0-85404-816-2

„Die Zeit ist gekommen, Computermethoden in der Wirkstoffsuche anzuwenden. Mehrere Techniken, alte und neue, sind zu wirkungsvollen Waffen im Kampf gegen Krankheiten herange-

reift“. Mit diesen vollmundigen Worten beginnt das Buch, das auf Vorträgen eines von der Royal Society of Chemistry veranstalteten Treffens „Cutting Edge Approaches to Drug Design“ gründet. Dies allerdings nur zum Teil, denn im Vorwort wird bedauernd festgestellt, dass etwa die Hälfte der Vortragenden kein Manuskript liefern konnte oder wollte. Um das Wichtigste vorwegzunehmen: Die verbliebenen Beiträge zur Hochdurchsatz-Kristallographie in der Wirkstoffsuche (T. Blundell), zu Bioinformatik-Anwendungen für die Genomanalyse von GPCRs („G-Protein-gekoppelten Rezeptoren“; T. Atwood und D. Flower), zum virtuellen Screening (zwei Kapitel, D. Green bzw. I. McLay) und zur Rolle der Physikalischen Chemie für die Definition wirkstoffartiger Eigenschaften (A. Davis und R. Riley) zählen zu den guten bis sehr guten Artikeln des Buches. Die Literaturstellen sind bis einschließlich 2001 erfasst, in Einzelfällen sogar bis ins Jahr 2002 (sic! – der eintägige Workshop fand im März 2001 statt). Ein weiteres Kapitel zu Mutagenese und Modeling der „TM2-Loop-TM3“-Region von Neurotransmitter-GPCRs wirkt hier etwas verloren. Es entspricht einer eng ausgerichteten Originalarbeit, einschließlich einer experimentellen Vorschrift zur Gewinnung der GPCR-Mutanten. All diese Kapitel machen aber nur 80 Seiten aus, deutlich weniger als die Hälfte des Buches.

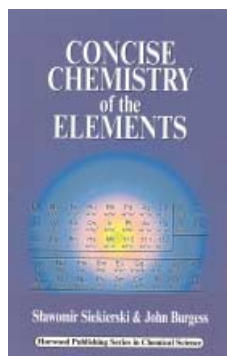
Die anderen 100 Seiten dieses Werkes bestehen aus zwei etwa gleich umfangreichen Kapiteln des Herausgebers D. Flower. Das eine liefert eine sehr grundlegende Einführung in das Thema (einschließlich unnötiger Exkurse, etwa zur Schädlichkeit des Rauchens oder der Computersuche nach extraterrestrischer Intelligenz), das andere ist ein Bericht über die Anwendung von Computermethoden beim Entwurf von Impfstoffen (auch hier mit einem überflüssigen, mehrere Seiten langen Einschub, in dem unter Angabe historischer Todeszahlen auf die Kulturgeschichte von Seuchen wie Pocken, von AIDS, Kriegen, Hungersnöten, Überschwemmungen, Erdbeben und Vulkanausbrüchen eingegangen wird). Dies sind keinesfalls die Informationen, die ein Leser angesichts des Titels dieses Buches erwartet. Die Ein-

führung krankt daran, dass der Autor als Forscher am Edward-Jenner-Institut für Impfstoffforschung, Newbury, Großbritannien, seinen Schwerpunkt beim „Modeling“ von Proteinen hat, nicht im Bereich der klassischen Wirkstoffe; dementsprechend zeichnen die Literaturzitate kein repräsentatives Bild der allgemein angewendeten Methoden.

So wurde der Anspruch des Herausgebers, ein Werk zu liefern, das für den Laien verständlich und für den Fachmann anregend ist, auf sehr eigenwillige Weise umgesetzt: Zwar wird für jeden etwas geboten, aber das gesetzte Ziel wird trotzdem nicht erreicht. Wer an bestimmten Bereichen der Wirkstoffforschung, von der Kulturgeschichte über einzelne experimentelle Techniken und Computermethoden bis zur (möglichen) zukünftigen Entwicklung von Impfstoffen interessiert ist, dem kann das Buch empfohlen werden. Der Fachmann ist mit Originalarbeiten oder aktuellen Übersichtsartikeln besser bedient.

Hugo Kubinyi
Weisenheim am Sand

Concise Chemistry of the Elements



Herausgegeben von Sławomir Siekierski und John Burgess. Horwood Publishing Ltd., Chichester 2002. 198 S., Broschur 20.00 £.—ISBN 1-898563-71-3

In diesem Buch werden in erster Linie die fundamentalen Eigenschaften von Atomen und deren Einfluss auf die chemischen und physikalischen Eigenschaften von Elementen erörtert. Besonderes Gewicht wird darauf gelegt, zu erklären, wie sich diese Eigen-

schaften mit der Stellung eines Elements im Periodensystem ändern.

Das Buch ist in zwei Teile gegliedert. Im ersten Teil, „General Properties“ (ca. 65 Seiten), wird beschrieben, wie die fundamentalen Eigenschaften von Atomen wie Radien, Energien, Ionisierungsenergien, Elektronenaffinitäten etc. die chemischen und physikalischen Eigenschaften von Elementen beeinflussen und wie und warum sich diese mit der Stellung im Periodensystem ändern. Im zweiten Teil (ca. 125 Seiten) werden anhand von Beispielen aus der Anorganischen Chemie die Änderungen der „Chemie“ der Elemente mit ihrer Stellung im Periodensystem erörtert. Besonders detailliert werden die einzigartigen Eigenschaften der ersten s-, p- und d-Schalen, der Einfluss der gefüllten 3d- und 4d-Schalen auf die Eigenschaften der p- und d-Block-Elemente und relativistische Effekte abgehandelt. Besonders letztgenannter Themenkreis, der kinematische und Spin-Bahn-Kopplungs-Effekte, die für alle Elemente existieren, aber mit steigender Kernladungszahl deutlich stärker werden, mit einschließt, wird kurz in Teil I diskutiert und in Teil II mit vielen Beispielen, Diagrammen, Abbildungen und Tabellen illustriert. Diese Tatsache, zusammen mit der Anwesenheit eines Kapitels über superschwere Elemente, machen das Buch zu einer sehr nützlichen Lektüre für Studierende vor und nach dem Diplom.

Das Buch ist gut organisiert und klar geschrieben. Es ist nicht umfassend, sondern konzentriert sich auf die oben aufgeführten Schwerpunkte. Das Schlagwortregister ist vielleicht etwas knapp geraten, sodass man in dem Buch viel mehr findet, als im Register aufgelistet ist. Die Qualität des Drucks und speziell einiger Abbildungen lässt leider oft zu wünschen übrig. Einige Ausdrücke wie Hypervalenz (sp^3d^2 -Hybridisierung wird für SF_6 diskutiert) und Hyperkoordination sind nicht exakt genug definiert und verursachen etwas Verwirrung. Der Ausdruck „apparent hypervalence“, um beispielsweise zu diskutieren, dass Schwefel in SF_6 nicht notwendigerweise seine Valenzschale

aufweitet (keine d-Orbital-Beteiligung), wird gar nicht erst eingeführt. Es ist ebenfalls nicht korrekt, dass für SF_6 ein MO-Schema gezeichnet wird, in dem S lediglich seine 3s- und die drei 3p-Orbitale zur Bindung benutzt, die Zahl der bindenden Elektronen acht ist und dennoch SF_6 als „hypervalente Verbindung“ bezeichnet wird (siehe z. B. R. D. Harcourt, *Chem. Eng. News*, **1985**, January 21, 3). Ebenfalls ist es sehr verwirrend, dass für O_2 und N_2 qualitativ identische MO-Schemata gezeichnet werden, während ein Photoelektronenspektrum rasch zeigen würde, dass das MO-Schema für N_2 nicht korrekt ist (siehe z. B. J. W. Rabalais, *Principles of Ultraviolet Photoelectron Spectroscopy*, Wiley, London, New York, **1977**). Der derzeit beste Wert für den Kovalenzradius von F ist nach Ansicht des Rezensenten 0.54 \AA (vgl. R. J. Gillespie, E. A. Robinson, *Inorg. Chem.* **1992**, *31*, 1060) und nicht 0.57 \AA , wie von den Autoren angegeben. Auch die Behauptung, dass ClO_2 nicht dimerisiert, obwohl es ein Molekül mit ungerader Elektronenzahl ist, ist nicht korrekt (vgl. A. Rehr, M. Jansen, *Angew. Chem.* **1991**, *103*, 1506, und A. Rehr, M. Jansen, *Inorg. Chem.* **1992**, *31*, 4740). Da die Autoren, erfreulicherweise, besonderes Gewicht auf schwere Elemente, relativistische Effekte, die Gold- sowie die Edelgaschemie legen, wäre auch die Aufnahme des kristallographisch charakterisierten Ions $[AuXe_4]^{2+}$ (vgl. K. Seppelt et al., *Science* **2000**, *290*, 117) in Kapitel 14 wünschenswert gewesen.

Zusammenfassend ist dieses Buch eine sehr willkommene Bereicherung der vorhandenen Literatur, dessen Lektüre sowohl Studierenden als auch Diplomanden und Doktoranden sehr zu empfehlen ist. Die (möglichst rasche) Publikation einer zweiten Auflage, in der auch die in der ersten Auflage fast unvermeidlichen Fehler beseitigt werden könnten, ist schon jetzt sehr wünschenswert.

Thomas M. Klapötke
Department Chemie
Universität München