



Asymmetric Catalysis on Industrial Scale



Challenges, Approaches and Solutions. Herausgegeben von **Hans-Ulrich Blaser** und **Elke Schmidt**. Wiley-VCH, Weinheim 2004. 454 S., geb., 159.00 €.—ISBN 3-527-30631-5

Dieses Buch widmet sich der industriellen Anwendung der asymmetrischen Katalyse und beschreibt in ca. 25 Fallstudien die Umsetzung von Laborverfahren in den technischen Maßstab. Den Auftakt im Kapitel „New Processes for Existing Active Compounds“ bildet der Beitrag des Nobelpreisträgers William Knowles zum L-Dopa-Prozess. Auch wenn sich dieser schon seit Jahren in den Lehrbüchern findet, ist es ein spannender und lehrreicher Einstieg in das Thema, besonders wenn man den folgenden Beitrag von R. Selke – ebenfalls einer der Altmeister der asymmetrischen Hydrierung – zum Vergleich liest. Die Metolachlor-Synthese (H.-U. Blaser et al.), der zurzeit an der Tonnage gemessen weltweit größte asymmetrische Prozess, die Roche-Arbeiten zu enantiomerenreinem Vitamin E (T. Netscher et al.) und eine Fallstudie – vier Wege zu (R)-Hydroxyphenylbutyrat – bilden den Abschluss der chemischen Katalyse des ersten Teils. In weiteren drei Fallstudien schließen sich biokatalytische Methoden zur Synthese von L-Carnitin, 7-ACA und L-Aminosäuren an.

Im zweiten Kapitel („New catalysts for Existing Active Compounds“)

finden sich ebenfalls biokatalytische und chemische Methoden: Hydroxynitril-Lyasen, die katalytische Epoxid-Öffnung nach Jacobsen, asymmetrische Transferhydrierung, Oxidoreduktasen und Arbeiten zu chiralen C₃- und C₄-Synthons stehen im Mittelpunkt.

Auf nichtnatürliche Aminosäuren, die DuPhos-Liganden, asymmetrische Hydrierungen bei Lonza und die biokatalytische Herstellung von Laborchemikalien ist der Fokus des dritten Kapitels, „Adaption of Existing Catalysts for Important Building Blocks“, gerichtet.

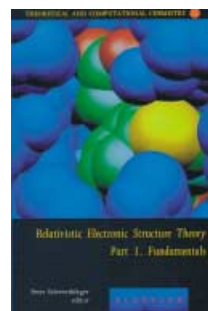
Einen weiten Bogen spannt das vierte und letzte Kapitel „Processes for New Chemical Entities“: Dehydrogenasen, Cyclopropanierungen, Hetero-Diels-Alder-Reaktionen in Kombination mit einem enzymatischen Schritt, dynamische kinetische Racematspaltung mit Thioestern, asymmetrische Oxidation am Schwefelzentrum und drei Protease-katalysierte Prozesse werden im Detail vorgestellt.

Dieses Buch ist ein „Muss“ für Prozessentwickler, wobei nicht nur Chemiker, sondern auch Biochemiker angesprochen sind. Auch für die Wirkstoffsuche ist es eine wertvolle Informationsquelle, die es erlaubt, möglichst frühzeitig auf ein zum Upscaling geeignetes Prozedere hinzuwirken. Die Herausgeber haben großen Wert auf Aktualität gelegt, die Themen sind breit gewählt und sehr gut recherchiert und aufbereitet. Daneben lässt sich das Buch auch „einfach so“ gut lesen, die Vielfalt der Themen lädt geradezu zum Schmökern ein! Erfreulich klar wird auch dargestellt, dass es nur selten einen Königsweg zum Produkt gibt und meist eine Kombination aus chemischen und enzymatischen Methoden zum Ziel führt. Besonders bemerkenswert ist schließlich, dass auch Routen und Prozesse vorgestellt werden, die sich aus unterschiedlichsten Gründen als Sackgassen erwiesen haben. Hieraus kann der Anwender Wertvolles lernen und in die eigene Prozessentwicklung einfließen lassen.

Rainer Stürmer
BASF AG
Ludwigshafen

DOI: 10.1002/ange.200385161

Relativistic Electronic Structure Theory



Part 1. Fundamentals. Herausgegeben von **Peter Schwerdtfeger**. Elsevier Science, Amsterdam 2002. 930 S., geb., 340.00 €.—ISBN 0-444-51249-7

Die Anfänge der relativistischen Quantenchemie sind generell mit dem Namen Paul Dirac verbunden, der seine grundlegenden Arbeiten über den relativistischen Formalismus der Quantenmechanik 1928 veröffentlicht hat. Es dauerte fast 50 Jahre, bis die Bedeutung relativistischer Effekte in der Chemie erkannt wurde. Pekka Pyykkö, einer der richtungsweisenden Forscher auf diesem Gebiet, zeigte schon Mitte der 1970er Jahre, wie wichtig relativistische Effekte bei der Beschreibung molekularer Systeme sein können. Andere haben ebenfalls zur schnellen Entwicklung beigetragen, sodass die relativistische Quantenchemie heute ein Gebiet mit lebhafter Forschung zur Methodenentwicklung, zu Computercodes und zu Anwendungen ist. Dass jetzt ein zweibändiges Werk herausgegeben wird, das einen aktuellen Überblick über diesen Forschungsbereich bietet, ist nur zu begrüßen.

Der erste Band, der Pyykkö zum 60. Geburtstag gewidmet ist, behandelt hauptsächlich die Grundlagen der relativistischen Methoden. Jedes der 15 Kapitel wurde von namhaften Experten im Stil eines Lehrbuchbeitrags verfasst. In Kapitel 1 erhält der Leser eine Einführung in relativistische Atom- und Molekülrechnungen, wobei die erweiterte Anwendung der Dirac-Gleichung auf Mehrelektronensysteme beschrieben wird. Kapitel 2 befasst sich mit dem Dirac-Operator. Hier werden die freie Dirac-Gleichung und Probleme der relativistischen Quantenkinematik, die mit dem Auftreten von negativen Energiewerten verbunden sind, erörtert. In Kapitel 3 folgt eine Beschreibung relativistischer selbstkonsistenter Felder