

engen Projektzeitfenstern die chemische Bearbeitung komplizierter Naturstoffe möglich ist, wobei hier die Semisynthese aus fermentativ gut zugänglichen Ausgangsstoffen oft bevorzugt wird. Der spannende Beitrag umfasst die *initialen* Entwicklungsstufen einer industriellen Naturstoff-Erfolgsstory vom Screening-Hit über erste semisynthetische Annäherungsversuche, effizientere Large-Scale-Synthesen, enzymkatalysierte Derivatisierungen, Mechanismusstudien mit radiomarkierten Substanzen, toxikologische Betrachtungen und schließlich „späte“ totalsynthetische Arbeiten zur Abrundung der Struktur-Aktivitäts-Beziehungen.

Eine aufwändige Übersicht behandelt über 660 schwefelhaltige Naturstoffe aus marinen Invertebraten (Schwämmen, Tunicaten und Bryozoen). Hier finden sich Sulfonsäuren, Sulfide, Thiocyanate und Thiazole als Strukturelemente in Terpenoiden, Alkaloiden, Peptiden und Depsipeptiden, deren publizierte Stereochemie von Prinsep kritisch diskutiert wird. Schade ist, dass die „enzyklopädische“ Übersicht nicht auch für zusammenfassende, generelle Bemerkungen zu Biosynthese und Wirkrelevanz der besprochenen Schwefel-Substrukturen genutzt wird. So stellt sich z. B. bei natürlichen Sulfaten immer die Frage, ob es sich um den „eigentlichen“ bioaktiven Sekundärmetaboliten, ein Prodrug oder aber um einen durch die Sulfatierung zwar löslichen, aber vielleicht weniger wirksamen Kataboliten des entsprechenden Naturstoff-Alkohols handelt.

Im vorliegenden Werk werden sehr verschiedene Gruppen von Struktur-

und Wirkklassen besprochen. Ein Hauptthema auszumachen fällt schwer. Naturgemäß kann der Band keine biologisch „abgeprüften“ Leitstrukturkonzepte beschreiben, dafür enthält er aber interessante Anregungen und Zusammenstellungen, insbesondere zur ZNS-, CHD- und Antikrebs-Wirkung von Flavonoiden, Terpenoiden und pflanzlichen Antioxidantien. Das sorgfältig ausgearbeitete Stichwortverzeichnis hilft hier bei der Suche nach Naturstoffen und Naturstoffextrakten bestimmter Wirkprofile. Im Sinne der Suche nach neuen Leitstrukturen und Targets, die ja für die Naturstoffchemie fast sinngebend ist, hätte die Bedeutung der beschriebenen Bioaktivitäten in vielen Fällen durch eine ausführlichere Diskussion zu Selektivität und Wirkstärke klarer herausgearbeitet werden können. So richtet sich der vorliegende Band wahrscheinlich mehr an Spezialisten der besprochenen Gebiete und weniger an Studenten. Dennoch sollte sich ein breiterer Leserkreis beim Durchblättern sowohl am strukturellen Erfindungsreichtum der Natur wie auch an den vielseitigen Wirkprofilen *scheinbar* einfach gebauter Naturstoffe erfreuen.

Franz von Nussbaum  
Medicinal Chemistry  
Bayer HealthCare AG  
Wuppertal

## Fundamental World of Quantum Chemistry



A Tribute to the Memory of Per-Olov Löwdin. 2 Bände. Herausgegeben von Erkki J. Brändas und Eugene S. Kryachko. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht 2003. 1370 S., geb., 459.00 €.— ISBN 1-4020-1290-X

*Fundamental World of Quantum Chemistry* vereinigt in zwei Bänden eine Sammlung von 49 Aufsätzen und Forschungsbeiträgen. Zusammengetragen wurden diese von Erkki Brändas und Eugene Kryachko in Gedenken an Per-Olov Löwdin, der die Quantenchemie auf vielfache Weise – in der Entwicklung des Gebietes, in der Lehre und in administrativer Hinsicht – vorangetrieben hat. Ziel ist es, Löwdins richtungsweisende Arbeiten in Erinnerung zu rufen und zu diskutieren. In den Beiträgen wird das breite Themenspektrum der Quantenchemie, beginnend mit Diskussionen grundlegender theoretischer und methodischer Fragen bis hin zu quantenchemischen Studien an ausgewählten molekularen Systemen, ausführlich dargestellt. Der erste Beitrag von H. Shull enthält zudem persönliche Erinnerungen des Autors an Löwdin und die Anfänge der Quantenchemie in Uppsala.

## Parr Instrument Labor-Reaktoren

### Glas-/Niedrigdruck-Reaktoren

Auswechselbare Glas- und Metallzylinder  
0,16 bis 1,5 Lit.. Auch Doppelwandzylinder

### Hochdruck-Kompakt-Reaktoren

Kompakte Tischreaktoren von 25 - 600 ml

### Labor-Reaktoren und -Druckbehälter

Von 25 ml bis 20 Liter in Edelstahl oder 10 anderen Legierungen bis 350 bar/350°C

### MRS 5000 Multi-Reaktions-System

Parr Instrument – Ihr Partner für Druckreaktionen



Kalorimeter, Druckbehälter, Reaktoren,  
Aufschluss-Systeme, Hydrierapparate



Parr Instrument (Deutschland) GmbH  
Roßkopfstraße 25 · D - 60439 Frankfurt a. M.  
Tel. 069 / 57 10 58 · Fax 069 / 5 87 03 00

info@parrinst.de · www.parrinst.de

Angesichts der großen Zahl an Arbeiten aus weltweit führenden Arbeitsgruppen können nicht alle Beiträge in dieser Rezension besprochen werden, auf einige Perlen wie die Aufsätze von Woolley und Sutcliffe über grundlegende Fragen der quantenchemischen Theorie von Molekülen und von Pauncz, der die Rolle des Spins im quantenchemischen Standardmodell diskutiert, sei aber besonders hingewiesen. Beide Beiträge stellen zudem einen engen Bezug zu den Arbeiten Löwdins her. Ebenso lohnenswert sind auch die Aufsätze von McWeeny über die Dichtematrixtheorie, von Varandas über die akkurate quantenmechanische Beschreibung kleiner Moleküle, die symmetriebrechenden Kräften (Jahn-Teller-Effekten) unterworfen sind, und von Vahtras et al. über Berechnungsmethoden für EPR-Spektren. In Band II, in dem unter anderem alle anwendungsbezogenen Arbeiten untergebracht sind, werden in insgesamt drei Beiträgen Rechnungen an DNA-Basenpaaren diskutiert, die Löwdins Ideen zur spontanen Punktmutationen berühren.

Es ist zu wünschen, dass die 49 Beiträge helfen werden, die Theorie innerhalb der Chemie weiter zu stärken, indem sie den universellen Charakter der Quantenchemie aufzeigen. Im letzten Beitrag des Philosophen Eric Scerri, eines der Vorreiter einer wieder-auflebenden Philosophie der Chemie, wird deutlich, wie die Quantenchemie

und ihre Konzepte wahrgenommen und verstanden werden. Scerri zeigt auf, wieviel Arbeit noch zu leisten ist, bis die Praxis der Computerchemie mit ihren Näherungen von den tatsächlichen Gegebenheiten der zugrundeliegenden reinen Theorie wohlgetrennt ist. So diskutiert Scerri beispielsweise die Rolle des „Basissatzes“ in quantenchemischen Rechnungen und Konsequenzen aus der semiempirischen Konstruktion von Basissätzen. Dabei wird die Differenz zwischen gewählter Praxis und Vorgaben der Theorie offensichtlich: Die Verwendung von Basissätzen ist in der Praxis von großem Vorteil, aber basissatzfreie Methoden, die in einem „first principles“-Sinne als Ausgangspunkt für Basissatz(näherungs)methoden verstanden werden können, sind für die Behandlung von Atomen gang und gäbe und inzwischen auch für nichtlineare Moleküle erprobt, wie gerade der Beitrag von Talman und Yan in Band I zeigt.

Hier zeigt sich beispielhaft, wie sehr sich die Konzepte, Methoden und Möglichkeiten der Quantenchemie noch in der Entwicklung befinden und als Erkenntnismittel diskutiert werden müssen. Daher ist es lohnend, die vielen Aspekte der Quantenchemie zusammenfassend Revue passieren zu lassen, wie in den vorliegenden Bänden geschehen. Leider wurde jedoch von den Herausgebern die Chance verpasst, die thematischen Zusammenhänge der

Einzelbeiträge durch eine entsprechende Gliederung und durch einen ausführlichen Index herzustellen. Dadurch wird es dem Leser nicht leicht gemacht, einen schnellen Überblick über die Fülle des Materials zu bekommen. Die Anbindung an die Originalarbeiten Löwdins hätte ebenfalls von einer solchen Gliederung profitiert, auch hätte man eine kurze Einführung in die Themen geben können, wodurch die spezialisierteren Beiträge für Nichtfachleute von größerem Wert wären. Vielleicht lässt sich dies in einer zukünftigen Auflage korrigieren und vielleicht können dann auch wichtige, bisher ausgelassene Themen wie relativistische Hamilton-Operatoren, Wellenpaketdynamik oder Ab-initio-Molekulardynamik berücksichtigt werden.

Das Werk *Fundamental World of Quantum Chemistry* kann allen Interessierten zum Stöbern empfohlen werden: Es gibt Einblicke in den aktuellen Stand der Forschung, in geschichtliche Entwicklungen und sollte das Gefühl hinterlassen, dass die grundlegende Theorie der Chemie und ihre Darstellung noch nicht abgeschlossen sind.

Markus Reiher

Lehrstuhl für Theoretische Chemie  
Universität Bonn

DOI: 10.1002/ange.200385109