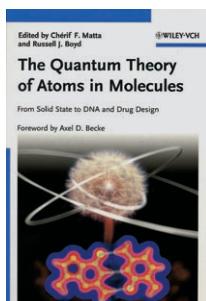




The Quantum Theory of Atoms in Molecules



From Solid State to DNA and Drug Design. Herausgegeben von Chérif F. Matta und Russell J. Boyd. Wiley-VCH, Weinheim 2007. 529 S., geb., 159.00 €.—ISBN 978-3-527-30748-7

Die von Richard Bader und Mitarbeitern entwickelte Quantentheorie der „Atome in Molekülen“ (QTAIM) hat mittlerweile in vielen Bereichen der Chemie, Physik und Biologie große Bedeutung erlangt. Das vorliegende, Richard Bader zum 75. Geburtstag gewidmete Buch ist sehr willkommen, denn Baders maßgebende Monographie, *Atoms in Molecules – A Quantum Theory* (Oxford University Press, 1990), wurde seit ihrem Erscheinen vor fast zwei Jahrzehnten in mehr als 3000 Publikationen zitiert, wobei mehr als die Hälfte in den Jahren 2002 bis 2006 erschienen ist.

Kapitel 1 ist eine kurze Einführung in die QTAIM, wobei die Herausgeber meines Erachtens eine der nützlichsten der mir bekannten Zusammenfassungen zum Thema liefern. Die wichtigsten Konzepte, die den in den folgenden Kapiteln im Detail beschriebenen Anwendungen zugrunde liegen, werden knapp und präzise erläutert. Die folgenden 19, von insgesamt 49 Autoren verfassten Kapitel sind auf fünf Buchabschnitte verteilt. Diese Einteilung erfolgte nach Auskunft der Herausgeber „purely and exclusively based on what we think is their logical order“. Trotz der

unvermeidlich vielen Wiederholungen in den Kapiteln verleiht diese Einteilung dem Buch eine Ordnung, die angesichts der Themenvielfalt durchaus auch hätte geringer werden können. Die zahlreichen Querverweise in den Kapiteln vermitteln eine gewisse Geschlossenheit der Beiträge, wie sie in Mehrautorenwerken oft schmerzlich vermisst wird.

Der erste Abschnitt, „Advances in Theory“, wird durch ein Kapitel von Bader eröffnet, das sich – „written by a chemist for other chemists“ – vor allem an junge Kollegen richtet. Trotz dieser Zielsetzung und Baders offensichtlichem Bestreben, den Stoff so einfach wie möglich darzustellen, werden nur sehr wenige Chemiker, junge oder auch ältere, die notwendigen mathematischen Kenntnisse haben, um diesem Beitrag gerecht zu werden. Weitere Beiträge in diesem Teil des Buchs beschäftigen sich mit Anwendungen der QTAIM zur Beschreibung von Eigenschaften wie Polarisierbarkeit und Magnetisierbarkeit auf atomarer Ebene, einer detaillierten Analyse von Raman-Streuungsintensitäten, der Aufspaltung der molekularen Austauschenergie sowie der Topologie der Elektronenlokalisierungsfunktion (ELF) und ihrer Beziehung zur VSEPR-Theorie. Beim Lesen dieser Kapitel drängt sich eine wichtige Frage auf: Was genau wird gewöhnlich mithilfe der QTAIM erhalten und was nicht? Was ist quantenchemische Topologie (QCT) und wie hängt sie mit der QTAIM zusammen? Die ELF ist beispielsweise kein Ergebnis der QTAIM, aber zwischen ihrer topologischen Analyse und der Analyse der Elektronendichte und ihrem Laplace-Operator bestehen viele Parallelen. In Kapitel 5 erhält der Leser den Eindruck, die QCT sei gleichbedeutend mit der QTAIM. In Kapitel 6 wird die QCT jedoch als eine durch die Topologie der ELF erweiterte Form dargestellt. Diese Inkonsistenz ist etwas verwirrend, zumal in der an sich sehr nützlichen Liste mit Erklärungen von Abkürzungen neben QCT und QTAIM die Akronyme AIM („atoms in molecules“) und QTAMC („quantum theory of atoms in molecules and crystals“) auftauchen.

Der zweite Abschnitt, „Solid State and Surfaces“, umfasst drei Kapitel über Anwendungen der QTAIM zur Be-

schreibung eines molekularen Feststoffs (Harnstoff), von Siliciumoberflächen, anorganischen Clathraten, anorganischen (vor allem binären) Feststoffen und aktiven Zentren auf Oberflächen mit Schwerpunkt auf MoS₂-Katalysatoren für die Hydrodesulfurierung. Die Ausführungen werden anhand ausgewählter, teils farbiger Abbildungen veranschaulicht, wobei die Diskussion des Themas und die entsprechende Abbildung immer unmittelbar aufeinander folgen und nicht an getrennten Stellen im Kapitel erscheinen. Dies ist eine der vielen Stärken des Buchs.

QTAIM-Methoden wurden vielfach für Ladungsdichteanalysen angewendet, basierend auf präzisen Tieftemperatur-Röntgenstrukturdaten von Einkristallen. Im Abschnitt „Experimental Electron Densities and Biological Molecules“ werden aktuelle Ergebnisse von drei auf diesem Gebiet aktiven Forschungsgruppen vorgestellt. In Kapitel 10 wird die gemeinsame Anwendung von QTAIM und Dichtefunktionaltheorie (DFT) zur genäherten Berechnung von Energiedichten aus experimentellen Elektronendichten beschrieben. Leider wird in diesem Kapitel der Anschein erweckt, QTAIM und QTAMC seien zwei unterschiedliche Theorien, obwohl sie doch ein und dasselbe sind. Eine Zusammenfassung aktueller Arbeiten über die Ableitung experimenteller Elektronendichten von Proteinen mithilfe experimenteller Daten aus einer Datenbank und eine eingehende Diskussion über aus der Elektronendichte menschlicher Aldose-reduktase abgeleitete topologische und elektrostatische Eigenschaften findet der Leser in Kapitel 11. Als Ergänzung hierzu ist der anschließende Beitrag über die Übertragbarkeit von theoretischen Fragmenten aus einer Datenbank von Multipolparametern zur Berechnung von Aminosäuren und Peptiden zu sehen. Dieses Kapitel enthält auch eine präzise Zusammenfassung experimenteller Elektronendichtestudien.

„Chemical Bonding and Reactivity“, der vierte Buchabschnitt, enthält Beiträge über QTAIM-Berechnungen von dativen Metallbindungen, Metalcarbohydren, Metall-Metall-Bindungen, Dreizentren- und noch ungewöhnlicheren Metallbindungen, zur Elektronendelokalisierung, Konformationsanalyse und

Aromatizität sowie von topologischen Eigenschaften von Wasserstoffbrücken. Außerdem ist hier ein auf einer Zerlegung der Wechselwirkungsenergie basierender Vergleich zwischen unterschiedlichen Typen von Wasserstoffbrücken zu finden. Wie alle Kapitel des Buchs bieten auch diese Beiträge einen ausgezeichneten Überblick über das jeweilige Thema. Eine weitere Gemeinsamkeit der Kapitel ist die hohe Qualität ihrer Bibliographien: Alle wichtigen Arbeiten werden erwähnt.

Zwei Kapitel im fünften Abschnitt „Application to Biological Sciences and Drug Design“ schließen dieses hervorragende Buch ab. Der eine Beitrag führt in die quantitative Struktur-Wirkungs-

Beziehung (QSAR), die Wirkstoff-Findung und aktuelle Anwendungen von QTAIM-Deskriptoren ein, während der andere sich mit dem Laplace-Operator der Elektronendichte und dessen Anwendungen auf vielen Gebieten, unter anderem bei der Pharmakophor-Erkennung, beschäftigt.

Dieses hervorragende Buch über ein Thema, das in vielen Bereichen der Wissenschaft von großer Bedeutung ist, ist eine wichtige Bereicherung der einschlägigen Literatur. Trotz der vorangestellten Aussage der Herausgeber: „this volume may equally be used as a textbook without compromising its research-oriented character“, handelt es sich zweifellos um ein sehr forschungs-

orientiertes Werk. Wer sich für das Gebiet interessiert und eine präzise Einführung mit zusammenfassenden Berichten über aktuelle Anwendungen sucht, wird dieses Buch mit Gewinn lesen. Die Würdigung Richard Baders anlässlich seines 75. Geburtstags ist mit diesem Werk hervorragend gelungen.

Mark A. Spackman

School of Biomedical, Biomolecular and Chemical Sciences
University of Western Australia, Crawley (Australien)

DOI: [10.1002/ange.200785505](https://doi.org/10.1002/ange.200785505)

Don't bet on the wrong horse!



13274402_gu

Zeit ist ein knappes Gut. Sparen Sie sich langes Suchen und registrieren Sie sich jetzt für den kostenlosen Wiley-VCH Alerting Service.

www.wiley-vch.de/publish/dt/pas/

 **WILEY-VCH**



www.chemistry.de

*Auf die Chemie kommt es an.
Immer und überall.*

Produkte des FIZ CHEMIE Berlin:
CHEMGAROO, INFOTHERM, ChemInform

Bergmann & Partner, Berlin

FIZ 7013/004

Ihre Quelle für Informationen

- Organische Synthese
- Bioaktive Verbindungen
- Thermophysikalische Stoffdaten
- Internet-Suchmaschinen
- eLearning

Telefon: +49 30 399 77 0
E-Mail: info@chemistry.de



FIZ CHEMIE BERLIN
Fachinformationszentrum Chemie GmbH