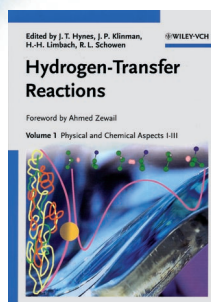




Hydrogen-Transfer Reactions



Bde. 1–4. Herausgegeben von *James T. Hynes, Judith P. Klinman, Hans-Heinrich Limbach* und *Richard L. Schowen*. Wiley-VCH, Weinheim 2006. 1559 S., geb., 499.00 €.—ISBN 927-3-527-30777-7

Hynes, Klinman, Limbach und Schowen legen eine eindrucksvolle Sammlung von kurzen Aufsätzen über Wasserstofftransferreaktionen und ihre Anwendungen in der organischen Chemie, der Biochemie und den Materialwissenschaften vor. Experimentelle Techniken und Ergebnisse und deren theoretische Beschreibungen auf unterschiedlichen Komplexitätsniveaus werden von führenden Wissenschaftlern des jeweiligen Spezialgebiets präsentiert. Der Schwerpunkt liegt auf den physikalischen und chemischen Facetten und mechanistischen Details des Transfers von Protonen, Wasserstoffatomen und Hydridionen, wobei die beiden letzteren als protonengekoppelte Elektronentransferreaktionen aufgefasst werden. Da Wasserstoff das leichteste Element ist, sind Protonen besonders anfällig für quantenmechanisches Tunneln. Die experimentellen Hinweise dafür sind die Tunnelaufspaltung von Schwingungsenergieniveaus sowie charakteristische kinetische Isotopeneffekte und das Nicht-Arrhenius-Temperaturverhalten von Geschwindigkeitskonstanten. Die Diskussion dieser Themen wird durch Kapitel über Wasserstoffbrückenbindungen und Säure-Base-Katalyse abge-

rundet. Ausgewählte Anwendungsbeispiele kommen aus den Materialwissenschaften, der organischen Chemie und der Biochemie.

Die vier Bände sind in zwei große Blöcke aufgeteilt, zum einen physikalische und chemische Aspekte, zum anderen biologische Aspekte von Wasserstofftransferreaktionen. Jeder der Blöcke ist in weitere Teile gegliedert, die ihrerseits aus den einzelnen Kapiteln bestehen, die von mehr als 80 Autoren stammen. Die Blöcke und Teile werden jeweils durch einen kurzen Überblick der Herausgeber über den Inhalt der einzelnen Kapitel eingeleitet. Hier wäre es schön gewesen, wenn die Herausgeber die Gelegenheit intensiver genutzt hätten, die einzelnen Teile zu einem größeren Ganzen zusammenzufügen. Jedes Kapitel ist in sich abgeschlossen. Folglich wiederholen sich Definitionen, Einleitungen und Schlüsselargumente zeitweise, aber die gleiche komplexe Idee auf unterschiedliche Art zu präsentieren, vertieft auch das Verständnis. Einige wenige Autoren beschränken sich ausschließlich auf Arbeiten ihrer eigenen Gruppe, die Mehrheit gibt jedoch eine ausgewogene Einführung in ein breiteres Teilgebiet, mit Verweis auf Schlüsselartikel der Originalliteratur.

Kinetische Isotopeneffekte und Tunneln sind der rote Faden, der den physikalisch-chemischen mit dem biologischen Block der Bände verbindet. Die zweite Verknüpfung wird durch den Beitrag der Gerüstschwingungen zum Protonen- und Wasserstofftransfer hergestellt, der durch ultraschnelle Spektroskopie aufgedeckt wurde. Dieser findet seine Entsprechung in der Bewegung des Proteinrückgrats beim enzymkatalysierten Wasserstofftransfer. Die aktuelle Kontroverse, ob Enzyme quantenmechanisches Tunneln einsetzen bzw. verstärken, um ihre Katalyseziele, d. h. Beschleunigung der Reaktion und Erhöhung der Selektivität, zu erreichen, nimmt breiten Raum ein und ist vermutlich der inspirierendste Aspekt des Werks.

Die Grundlagen von Wasserstofftransferreaktionen werden umfassend diskutiert. Zu den unvermeidlichen Auslassungen gehören Car-Parinello-Simulationen des Protonentransfers in Wasser, Protonendiffusion in Edelgasmatrizen und C-H-Aktivierung durch

Übergangsmetallionen in der Gasphase. Die breite Palette von Anwendungen außerhalb der Biochemie ist nur oberflächlich angerissen, so fehlt die homogene metallorganische Katalyse vollständig. Heterogene Katalyse ist implizit in den Kapiteln über Zeolithe und elementaren Wasserstoff auf Metalloberflächen enthalten.

Da nur Wenige alle 1500 Seiten des vierbändigen Werkes lesen werden, hilft ein 33-seitiges alphabetisches Stichwortverzeichnis beim Finden des relevanten Kapitels. In Anbetracht der durch das Thema bedingten Heterogenität des Materials gibt es keinen schnellen und einfachen Zugang zum reichhaltigen Inhalt. Die Gefahr besteht, dass das Buch nach dem ersten Durchblättern wieder ins Regal wandert, weil anwendungsorientierte Studierende durch die anfänglichen Kapitel über ultraschnelle Spektroskopie und Tunnelaufspaltungen abgeschreckt werden, ohne zu ahnen, dass „ihre“ Kapitel erst später kommen. Die Stärke der Bücher liegt in der Interdisziplinarität: Ultraschnelle Spektroskopie von kleinen Molekülen wird mit Enzymkinetik, die Synthese komplizierter Modellverbindungen für die Enzymkatalyse und künstliche Enzyme werden mit den kleinstmöglichen Molekülen, die intramolekularen Protonentransfer aufweisen, in einen sinnvollen Zusammenhang gebracht. Es erfordert allerdings einiges an Zeitaufwand und Anstrengung, um die tiefgehenden Ideen der einzelnen Kapitel richtig zu würdigen.

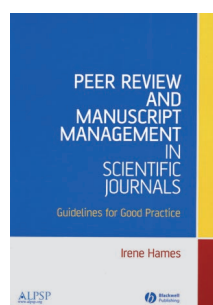
Das vierbändige Werk ist unentbehrlich für Wissenschaftler, die kinetische Isotopeneffekte und Tunneln untersuchen, wie bereits die Namen der Herausgeber vermuten lassen. Synthetisch arbeitenden organischen und anorganischen Chemikern sowie Biochemikern werden lesbare kurze Darstellungen fundamentaler physikalisch-chemischer Ideen zur Verfügung gestellt, die in den letzten 20 Jahren entwickelt und verfeinert wurden und nicht nur für Wasserstofftransferreaktionen relevant sind. Dozenten für physikalische Chemie profitieren von einer Fundgrube an Abhandlungen aus erster Hand über eine große Vielfalt hochaktueller experimenteller Methoden und theoretischer Konzepte. Die Verknüpfungen zu modernen Anwendungen in

der Biochemie wie auch zu Brennstoffzellen werden vor allem für Studierende attraktiv sein.

Martin K. Beyer
Institut für Physikalische Chemie
Universität Kiel

DOI: 10.1002/ange.200685489

Peer Review and Manuscript Management in Scientific Journals



Guidelines for Good Practice. Von Irene Hames. Blackwell Publishing, Oxford 2007. 293 S., Broschur, 19.99 £.—ISBN 978-1-4051-3159-9

Um die Publikation von Manuskripten zweifelhafter Qualität in der Zeitschrift *Philosophical Transactions* zu verhindern, führte die Royal Society of London 1752 die Begutachtung durch fachnahe Experten („Peers“) ein. *Ulrich's Periodicals Directory* verzeichnet heute mehr als 22000 wissenschaftliche Zeitschriften mit Peer-Review. Trotz der Allgegenwärtigkeit von Peer-Reviews ist der redaktionelle Prozess von der Einreichung des Manuskripts über die Begutachtung durch Fachkollegen bis zur Publikation für die Autoren wenig transparent. Es ist das Verdienst von Irene Hames, seit 16 Jahren Herausgeberin von *The Plant Journal*, mit *Peer Review and Manuscript Management in Scientific Journals* erstmals ein Handbuch vorgelegt zu haben, das die Begutachtung und redaktionelle Bearbeitung von zur Publikation eingereichten Manuskripten im Detail und mit zahlreichen Good-Practice-Beispielen beschreibt.

Das Buch wendet sich in erster Linie an die Herausgeber wissenschaftlicher Zeitschriften, dürfte jedoch auch für Autoren von großem Interesse sein, da es Einblick in die Blackbox des Begut-

achtungsprozesses gewährt. Den Kern des Buches bilden die Kapitel 3 bis 5, in denen zunächst die Eingangsbeurteilung eines Manuskripts durch die Zeitschriftenredaktion, die externe Begutachtung durch Fachkollegen und schließlich der Prozess, der zur Entscheidung über die Annahme oder Ablehnung eines Manuskripts durch den Herausgeber führt, erläutert werden. Die Autorin geht in diesen Kapiteln auch auf eine Reihe heikler Fragen ein: Können Manuskripte auch ohne externe Begutachtung abgelehnt werden? Wie können geeignete und unabhängige Gutachter identifiziert werden? Wie sollte ein sachgerechtes Gutachten aufgebaut sein, welche Information sollte es enthalten? Wie sollte weiter verfahren werden, wenn sich die Gutachter über die Publikationswürdigkeit eines Manuskripts uneinig sind?

Kapitel 2 wendet sich eher an Herausgebernovizen und beschreibt anhand eines Flussdiagramms den Peer-Review-Prozess (S. 10) und was eine Zeitschriftenredaktion bei der Einführung eines solchen Verfahrens beachten sollte. Hinweise für den Umstieg von einem papierbasierten auf ein Online-Manuskriptverwaltungssystem finden sich in Kapitel 6.

Die Begutachtung von Manuskripten steht und fällt mit der Bereitschaft der Peers, diese Aufgabe für die wissenschaftliche Fachwelt zu übernehmen. Kapitel 7 gibt Hinweise für den pfleglichen Umgang mit der kostbaren Ressource Gutachter und zeigt auf, wie die Beziehung zwischen Redaktion und Fachexperten gestaltet sein sollte, damit die Gutachter der Zeitschrift die Treue halten.

Kapitel 8 erinnert alle beteiligten Parteien – Gutachter, Herausgeber und Autoren – an ihre ethische Verantwortung. Gutachter müssen beispielsweise Interessenskonflikte offenlegen, um eine faire Begutachtung zu gewährleisten, und sind zur Verschwiegenheit verpflichtet. Herausgeber sind als „Wächter der Wissenschaft“ dem Wissenschaftsethos verpflichtet. Sie müssen eine unabhängige, faire und transparente Begutachtung gewährleisten und ihre Entscheidungen ausschließlich nach wissenschaftlichen Qualitätskriterien treffen. Autoren sollten die ent-

sprechenden internationalen Usancen zur Regelung der Autorenschaft und die einschlägigen Regeln zur Sicherung guter wissenschaftlicher Praxis strikt befolgen.

Das abschließende Kapitel 9 beschreibt Verstöße gegen die Regeln guter wissenschaftlicher Praxis. Dazu zählt auf Seiten der Autoren beispielsweise die Fälschung von Daten, die Manipulation von Abbildungen, die mehrfache Publikation ein und derselben Ergebnisse, die gleichzeitige Einreichung eines Manuskripts bei mehreren Zeitschriften. Gutachter müssen der Versuchung widerstehen, sich an den Forschungsideen und -resultaten anderer zu bereichern und sich etwa durch die Verzögerung der Begutachtung selbst einen Vorteil zu verschaffen. Herausgeber dürfen ihre Position nicht missbrauchen und sollten sich dem Verhaltenskodex des *Committee on Publication Ethics* (COPE) unterwerfen.

Eiligen Lesern seien für einen Überblick die goldenen Regeln der Manuskriptbegutachtung und die Good-Practice-Checkliste im Anhang I des Handbuchs empfohlen. Von praktischem Nutzen dürften die im Anhang II publizierten Muster für Herausgeberbriefe, redaktionsinterne Checklisten und Begutachtungsbögen sein sowie die im Anhang III empfohlenen Webseiten der für das Zeitschriftenwesen einschlägigen Organisationen.

Es ist das große Verdienst dieses Handbuchs, auf 274 Seiten erstmals das Peer-Review-Verfahren zu beschreiben, wie es 250 Jahre nach seiner Einführung bei den *Philosophical Transactions* von vielen Fachzeitschriften heute praktiziert wird. Zu diesem gemeinhin als traditionelles Peer-Review bezeichneten Begutachtungsverfahren sind in den letzten Jahren Alternativen entwickelt worden (z. B. von den mittlerweile mehr als 2300 elektronischen Fachzeitschriften), die im Anhang IV leider nur auf sechs Seiten kurz vorgestellt werden.

Hans-Dieter Daniel
Sozialpsychologie und
Hochschulforschung, ETH Zürich
(Schweiz)