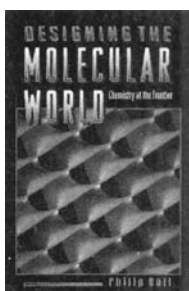


... aber ohne Chemie ist alles nichts

Designing the Molecular World. Chemistry at the Frontier. Von P. Ball. Princeton University Press, Princeton, 1994. 376 S., geb. 29.95 \$. – ISBN 0-691-00058-1

Es wurde hohe Zeit, daß dieses Buch geschrieben wurde. Chemische Forschung und Anwendung ihrer Ergebnisse ernsten in der Öffentlichkeit fast nur noch abfällige Kritik, und sogar Chemiker sind der Ansicht, die Forschung sei abgegrast, und es sei nichts wesentlich neues mehr zu erwarten. Da wirkt dieses Buch wie eine frische, reinigende Brise und rückt das Bild von der Chemie wieder zurecht. Philip Ball beschreibt umfassend die Ergebnisse der jüngsten chemischen Forschung. Viele der beschriebenen Begriffe hat es 1960 noch nicht gegeben. Kein großes Thema, das die Universitäten bewegt hat, wird ausgelassen: Flash-Photolyse und Lasertechnik zur Aufklärung von Reaktionsmechanismen und molekularen Strukturen; Quasikristalle, interpenetrierende Netzwerke, die Chemie des Lebens und der Selbstorganisation von Molekülen, Kronenether, Käfigstrukturen, Amphiphile usw. Ein Buch, wie es bisher noch keines gab!

Es sei auch geeignet für Leser ohne wissenschaftliche Ausbildung, wird im Klappentext behauptet. Das scheint mir zu optimistisch, denn Ball stürmt mit Sieben-Meilen-Stiefeln von Rutherfords Atommodell bis an die Grenzen der neuesten



Forschung. Kein Laie wird ihm da folgen können. Doch für den Naturwissenschaftler und für jeden mit naturwissenschaftlicher Vorbildung sollte das Buch zur Pflichtlektüre werden. Aber keine Angst vor der „Pflicht“ – schon nach den ersten Seiten wird die Lektüre zum Vergnügen. Der aktive, packende Stil des Autors, der auch „Ich-Sätze“ nicht scheut, und die übersichtlich aufgebauten Sätze erklären selbst die kompliziertesten Zusammenhänge auf verständliche Weise. (Eine Herausforderung übrigens für die deutsche Übersetzung, auf die wir hoffentlich nicht mehr lange warten müssen.)*

Ergänzt wird der Text von vorbildlichen Graphiken und Bildern, die zusammen mit den präzisen und ausführlichen Legenden eigene kleine Abschnitte bilden, die sogar ohne den Text schon verständlich sind. Hier hat ein wissenschaftlicher Redakteur alle seine Erfahrungen eingebracht. Man sollte Philip Ball unbedingt ermuntern, diesem ersten Buch weitere folgen zu lassen. Das Buch gehört vor allem in die Hand eines jeden Lehrers, vom Universitätsprofessor bis zum Studienrat, damit etwas von der Begeisterung über das Buch und die moderne Forschung auf Studenten und Schüler übergeht. Mir hat besonders das Kapitel „Caught in the Act, Watching Atoms Dance“ gefallen, weil es anschaulich macht, daß all die Vorstellungen von Übergangszuständen, die sich frühere Generationen machten, um Reaktionsmechanismen zu verstehen, keine bloßen gedanklichen Hilfsmittel waren, sondern daß sie tatsächlich in der Natur existieren, daß man sie sehen, fast anfassen kann. Eine bedeutsame Entwicklung auch für Erkenntnistheoretiker!

Wer bisher Schwierigkeiten hatte, Fraktale und die Chaostheorie zu verstehen, dem wird mit diesem Buch geholfen, und er wird sich nach der Lektüre fragen, was daran eigentlich so schwierig war. Natürlich fehlt das Kapitel über die Chemie der Atmosphäre und ihre anthropogenen Belastungen nicht, und wieder wird deutlich, daß es die Wissenschaftler waren, die die Probleme erkannt, ihre Ursachen er-

forscht und beschrieben und auch Lösungsmöglichkeiten vorgeschlagen hatten, lange bevor sich die Politiker mit der Problematik befaßten.

Ball versucht, Brücken zu schlagen zwischen der Chemie und der Informationstechnik, der Mikroelektronik, der Unterhaltungselektronik, dem Videorecorder, dem Farbfernseher, der Nachrichtentechnik, dem Gerätebau. Man könnte sich wünschen, daß er alle diese Zusammenhänge noch mehr vertieft und das Buch damit noch lebensnäher gemacht hätte, aber sie sind ausreichend skizziert, so daß man am Ende des Buches überzeugt ist: „Nicht alles ist Chemie, aber ohne Chemie ist alles nichts“.

Rudolf Fahrenstich
Mömbis

Computer Simulations of Biomolecular Systems. Theoretical and Experimental Applications. Vol. 2. Herausgegeben von W. F. van Gunsteren, P. K. Weiner und A. J. Wilkinson. ESCOM, Leiden (NL), 1993. 589 S., geb. 415.00 hfl. – ISBN 90-72199 15-4

Als vor etwa 18 Jahren J. A. McCammon, B. R. Gelin und M. Karplus die erste Moleküldynamiksimulation eines Proteins veröffentlichten (*Nature* 1977, 267, 585), war das Bild, das man sich von biologischen Makromolekülen machte, eher das von starren Körpern. Röntgenstrukturanalytisch hatte man die atomare Struktur mehrerer Proteine und der DNA bestimmen können. Die Ergebnisse wurden als starre Drahtmodelle dargestellt. Die Dynamik, die bei allen biologischen Prozessen eine entscheidende Rolle spielt, entzog sich – und entzieht sich – der direkten Beobachtung im Experiment, zumindest in atomarer Auflösung. Anhand der ersten Moleküldynamikrechnungen konnte man nun die Molekülbewegungen wie im Film mitverfolgen. Die Rechnungen waren auf verhältnismäßig kleine Moleküle beschränkt, und die simulierten Zeiten waren sehr kurz (im Bereich von Pikosekunden). Dennoch trugen die Simulationen entscheidend dazu bei, das

Diese Rubrik enthält Buchbesprechungen und Hinweise auf neue Bücher. Buchbesprechungen werden auf Einladung der Redaktion geschrieben. Vorschläge für zu besprechende Bücher und für Rezensenten sind willkommen. Verlage sollten Buchankündigungen oder (besser) Bücher an Dr. Ralf Baumann, Redaktion Angewandte Chemie, Postfach 101161, D-69451 Weinheim, Bundesrepublik Deutschland, senden. Die Redaktion behält sich bei der Besprechung von Büchern, die unverlangt zur Rezension eingehen, eine Auswahl vor. Nicht rezensierte Bücher werden nicht zurückgesandt.

[*] Eine deutsche Übersetzung dieses Buches wird bei der VCH Verlagsgesellschaft, Weinheim, voraussichtlich im Frühjahr 1996 erscheinen.

von den Drahtmodellen geprägte Denken zu verändern.

Das vorliegende Buch spiegelt die Entwicklung des Gebietes in den letzten 18 Jahren und seine aktuelle Bedeutung wider. In 25 Kapiteln geben mehrere Autoren einen Überblick über Simulationstechniken, Kraftfelder und Anwendungen. Eingeleitet wird das Buch sehr ausführlich von Martin Karplus. Allein das Inhaltsverzeichnis des Buches ist länger als der hier zur Verfügung stehende Raum. Daher können nur einige der behandelten Themen herausgegriffen werden.

In den ersten beiden Teilen des Buches werden Grundlagen behandelt, nämlich Simulationstechniken (Moleküldynamik- und Monte-Carlo-Algorithmen) und Kraftfelder. Ein Kraftfeld soll einerseits die quantenmechanische Realität so gut wie möglich annähern, andererseits schnell und effizient zu berechnen sein. Die begrenzte Rechenzeit zwingt immer zu Kompromissen. Vereinfachte Kraftfelder sind nötig, um langsame Prozesse wie die Proteinfaltung zu studieren. Aber auch detaillierte Kraftfelder bleiben Näherungen, und es ist für den Anwender wichtig zu wissen, welche Konsequenzen dies auf die Resultate seiner Rechnungen haben kann.

Eine der wichtigsten Anwendungen von Moleküldynamiksimulationen ist die Berechnung von Freien Energien. Das Buch bietet eine hervorragende Einführung in diesen Bereich, wobei großer Wert auf die Beschreibung von Schwierigkeiten und Fehlerquellen gelegt wird. Es gibt viele Beispiele für erfolgreiche Berechnungen Freier Energien. Andererseits wird auch deutlich, warum die berechneten Vorhersagen nicht immer richtig sein müssen.

Die drei Kapitel über Moleküldynamik bei der Verfeinerung von Molekülstrukturen in der Röntgenstrukturanalyse und der NMR-Spektroskopie nehmen in gewisser Hinsicht eine Sonderstellung im Buch ein. Hier wird der Moleküldynamikalgorithmus nicht zur Untersuchung der Dynamik eines Moleküls benutzt, sondern zur Optimierung für ein schwieriges nichtlineares Problem. Die hervorragenden Konvergenzeigenschaften der Moleküldynamik haben die Verfeinerung revolutioniert. Heute müssen immer weniger Schritte mühsam von Hand durchgeführt werden, und das Endergebnis, die verfeinerte Struktur, wird deutlich schneller erreicht. Erwähnt wird jedoch auch die enge Verbindung gerade zwischen NMR-Spektroskopie und Moleküldynamik.

Bei der Lektüre des Buches habe ich viel gelernt, und ich würde das Buch als eine gründliche Einführung in das Gebiet der

Simulation von Makromolekülen empfehlen. Das Buch ist eine wertvolle Quelle für praktische Informationen und als Nachschlagewerk unentbehrlich. Bei dem Vielautorenwerk ist ein etwas heterogener Eindruck wohl unvermeidlich, ebenso wie Überschneidungen in mehreren Kapiteln über ähnliche Themen. Ich empfinde letzteres jedoch als einen Vorteil, weil so wichtige Themen von verschiedenen Seiten beleuchtet werden. Alle im Buch angesprochenen Bereiche der Simulation von Makromolekülen sind aktive Forschungsgebiete, und wie schon im Vorwort deutlich wird, gibt es selbst für manche methodischen Fragen noch keine endgültigen Antworten. Dankenswert ist die kritische Distanz vieler Autoren zur eigenen Arbeit. Gerade für einen Neuling ist es außerordentlich nützlich, auf Probleme bei der Anwendung hingewiesen zu werden.

Michael Nilges

Europäisches Labor für Molekularbiologie (EMBL), Heidelberg

The Chemistry of Metal CVD. Herausgegeben von *T. T. Kodas* und *M. J. Hampden-Smith*. VCH Verlagsgesellschaft, Weinheim, 1994. 538 S., geb. 228.00 DM. – ISBN 3-527-29071-0

Die chemische Abscheidung aus der Gasphase (chemical vapor deposition, CVD), eine Methode zur Herstellung reiner Metallfilme für eine Vielzahl von Anwendungen, ist in jüngerer Zeit im Aufschwung begriffen. Die ursprünglichen Bedenken, daß durch MOCVD (metal organic chemical vapor deposition) abgeschiedene dünne Metallfilme grundsätzlich mit nicht tolerablen Anteilen von Kohlenstoff (oder Kohlenwasserstoff-Fragmenten) verunreinigt seien und so gewonnene Beschichtungen folglich nur bedingten Wert hätten, sind heute bei der inzwischen erbrachten Fülle von Gegenbeispielen zu relativieren. Der weitere Fortschritt ist jedoch noch immer sehr durch den Kommunikationsmangel zwischen Chemikern, Verfahrenstechnikern, Materialwissenschaftlern und Elektrotechnikern gehemmt. Mit diesem Problemfeld vor Augen wollten die Herausgeber des obengenannten Buches einen umfassenden Überblick über den Stand der Forschung (ca. 1470 Referenzen bis 1994) anbieten, die für eine heterogene Leserschaft aus unterschiedlichen Disziplinen gleichermaßen von Nutzen sein sollte.

Eine kurze Einführung (Kap. 1) ist der Metallkontaktierung siliciumbasierter Halbleiterbauelemente (z.B. Diffusions-

barrieren, Metallsilicidkontakte), zukünftigen Entwicklungsmöglichkeiten und den Vor- und Nachteilen gängiger Abscheidetechniken gewidmet. Danach wird in den Kapiteln 2–8 die Metallabscheidung von Al (2), W (3), Cu aus Cu^{II}-Vorläufern (4), Cu aus Cu^I-Vorläufern (5), Au und Ag (6), Pt, Pd und Ni (7) sowie Ta, Cr, Mo, Fe, Co, Rh, Ir und weniger gebräuchlichen Metalle, intermetallischen Phasen und Legierungen (8) behandelt. Die Beiträge über Al-CVD (M. G. Simmons und W. L. Gladfelter) und Cu-CVD (G. L. Griffin, A. W. Maverick, M. J. Hampden-Smith und T. T. Kodas) sind sehr geschlossen, inhaltsreich, didaktisch gut konzipiert und eignen sich daher auch als Rohstoff zum Einbau in materialchemisch ausgerichtete Kurse für Studenten der relevanten Fachrichtungen. Stichwörter wie das Zusammenspiel von Oberflächen und Gasphasenchemie, die Abhängigkeit von der Prozeßführung (Reaktortyp, Art der Energiezufuhr), ortsselektive Beschichtung, Pränucleation in der Gasphase, Reinheit, elektrische und morphologische Eigenschaften bilden nur einen kleinen Ausschnitt aus der Fülle der zwar knapp, aber prägnant und kompetent dargestellten Problemfelder. Die Kapitel 3, 6, 7 und 8 sind dagegen mehr im Stil einer nicht immer kritisch kommentierten, allerdings recht vollständigen Literaturübersicht abgefaßt. Die ausführliche stoffchemische Beschreibung der als Vorläufer eingesetzten Organometallverbindungen ist für den chemisch Vorgebildeten aber weitgehend, wenn nicht vollständig überflüssig. Für den Leser wäre es günstig gewesen, hätten die jeweiligen Autoren die Aufarbeitung der Literatur stärker gestrafft, da über weite Textpassagen lediglich die Inhalte von Tabellen paraphrasiert werden. In diesem Sinne unterscheiden sich die angebotenen Abhandlungen kaum von bereits verfügbaren neueren Übersichtsartikeln anderer Autoren in verschiedenen Journalen und Fortschrittsbänden. In Kapitel 8 wird eine gebündelte kritische Auseinandersetzung mit den vielen zusammengetragenen Einzelfakten versucht, die aber doch einiges vermissen läßt. So bleibt unter anderem weitgehend undiskutiert, welche Chancen für die MOCVD reiner metallischer Ti-, Cr-, V-, Nb- oder Ta-Filme, die ja alle ausgesprochene Carbiddarsteller sind, wirklich bestehen könnten. Insgesamt wird nur für wenige Fälle gesichertes mechanistisches Datenmaterial vorgestellt. Dies spiegelt aber weniger ein Versäumnis der Autoren denn die Tatsache wider, daß das Gebiet noch sehr in der Entwicklung begriffen ist, und so ist es nicht verwunderlich, wenn viele Abschnitte