

Nitrilen und Epoxiden unter Verwendung von Amidasen, Proteasen, Esterasen, Lipasen, Phosphatasen, Nitrilasen und Epoxidhydrolasen. Die Leistungsfähigkeit dieser Enzyme besonders in der Peptidsynthese sowie zur Gewinnung enantiomerenreiner Carbonsäurederivate und Hydroxyverbindungen wird anhand der Ergebnisse von etwa 400 Originalarbeiten belegt. Das dritte Kapitel ist der Anwendung von Enzymen bei Redoxreaktionen gewidmet. Da diese Reaktionen in der Regel von Nicotinamid-Cofaktoren abhängen, werden die Möglichkeiten der Cofaktor-Regenerierung ausführlich behandelt. Dargelegt werden auch die Grundlagen der Stereoselektivität NAD(P)-abhängiger Redoxreaktionen. Bei den Beispielen zur Reduktion und Oxidation nimmt Pflanzendehydrogenase besonders einen Raum ein. Es werden aber auch Anwendungen anderer Alkoholdehydrogenasen und zahlreicher Ketsäuredehydrogenasen sowie metallabhängiger Enolatreduktasen, Galactoseoxidase, Lipoxxygenase, Arendioxygenase und mehrerer Monooxygenasen in die Betrachtungen einbezogen. Die für die organische Synthese wichtige Knüpfung von Kohlenstoff-Kohlenstoff-Bindungen wird in Kapitel 4 behandelt. Der Schwerpunkt der Anwendungen liegt bei enzymkatalysierten Aldolreaktionen, aber auch Cyanhydrine, Acyloine und polycyclische Verbindungen wie Isoprenoide und Steroide sind durch entsprechende Enzyme präparativ zugänglich. Bei der durch Aldolasen katalysierten stereoselektiven Synthese von Monosacchariden, Neuraminsäure und verwandten Polyhydroxyverbindungen mit vielen Chiralitätszentren wird der erreichte Stand anhand zahlreicher Beispiele besonders eindrucksvoll belegt.

Die Rolle von Kohlenhydraten für die Funktion der Bakterienzellwand und ihre Bedeutung für Zelladhäsion, -differenzierung und -entwicklung haben das Interesse an der Synthese von Oligo- und Polysacchariden sehr stark wachsen lassen. Bei der Lösung der vielfältigen regio- und stereochemischen Syntheseprobleme spielen enzymatische Methoden eine immer wichtigere Rolle. Diese Entwicklung spiegelt sich im fünften Kapitel wider, das die Enzymkatalyse bei der Knüpfung glycosidischer Bindungen behandelt. Ausführlich werden Umwandlungen von Monosacchariden in die für die Glycosidbildung erforderlichen reaktiven Nucleosidphosphate sowie die Anwendung von Glycosyltransferasen beschrieben. Dabei wird deutlich, daß die Anwendung der Enzyme im präparativen Maßstab besonders auf diesem Gebiet durch ihre schlechte Zugänglichkeit noch stark eingeschränkt ist.

Im sechsten Kapitel werden enzymkatalysierte Additionen und Eliminierungen sowie enzymkatalysierte Übertragungen von Phosphat-, Methyl-, Sulfat- und Aminogruppen behandelt. Wegen der zentralen Bedeutung von Phosphorsäureestern in biochemischen Stoffwandlungsreaktionen werden die Regenerierung von ATP und die Synthese von phosphorylierten Kohlenhydraten besonders ausführlich dargelegt.

Das Buch erhebt nicht den Anspruch, eine allgemeine Einführung in die Grundlagen der Enzymologie oder der Biochemie zu liefern. Es bietet aber aufgrund der Gliederung in fünf auf wichtige Reaktionstypen bezogene Kapitel jedem synthetisch arbeitenden Organiker die Möglichkeit, sich schnell über den aktuellen Stand der Enzymkatalyse in der organischen Synthese zu orientieren. Anhand des Buches mit 1500 Literaturstellen kann sich der Interessierte sehr schnell darüber informieren, ob es aussichtsreich ist, ein Syntheseproblem durch die Anwendung der Enzymkatalyse zu lösen. Deshalb ist dieses Buch all denjenigen zu empfehlen, die das große Potential der Enzymkatalyse für ihre Arbeiten nutzen wollen.

Hans Schick

Institut für Angewandte Chemie
Berlin-Adlershof e.V.

SaferChem. Chemikalienverwaltung auf dem PC. Von G. Huttner und W. Pülm. VCH Verlagsgesellschaft, Weinheim, 1994. 4 Disketten und Handbuch, 998.00 DM, Hochschulversion 698.00 DM. – ISBN 3-527-29245-4

In Laboratorien, besonders in den wissenschaftlichen Arbeitsgruppen an Hochschulen, ist es wichtig, den Überblick und den raschen Zugriff auf den oft wertvollen Bestand an Reagentien und Feinchemikalien zu haben. Darüber hinaus verlangt die neueste Version der Gefahrstoffverordnung von jeder Institution, in der mit Gefahrstoffen umgegangen wird, die Führung eines Gefahrstoffverzeichnis (GefStoffV §16, Nr. 3a und TRGS 222), das der Aufsichtsbehörde kurzfristig verfügbar gemacht werden kann. Es ist naheliegend, ein solches Verzeichnis auf einem elektronischen Datenträger zu speichern und zu pflegen. Für das neue Chemikalienverwaltungsprogramm SaferChem läßt der Vorsatz „Safer“ vermuten, daß beide Anforderungen erfüllt werden.

Das Konzept der Autoren geht vernünftigerweise von einzelnen Chemikaliengebünden aus, die einem Arbeitsplatz

und damit einem Mitarbeiter oder einem Gebindeplatz (Chemikalienschrank oder Lager) zugeordnet werden. Für die Programmverwaltung bedarf es eines vom Arbeitskreisleiter bestellten Supervisors, der Platznummern, Pflichten und Zugangsberechtigungen im Programm einrichtet und an die Mitarbeiter vergibt. Die erstmalige Eingabe und die weitere Pflege des Gesamtbestandes wird dann dezentral, d.h. von den Mitarbeitern vorgenommen. So muß ein Mitarbeiter in der Maske des Programms für Gebinde zunächst *obligatorisch* die Gebindegröße, die Füllmenge in Prozent, die Stoffkonzentration und den Herstellernamen eingeben. Dann erst wird der im Gebinde enthaltene Stoff eingetragen, was durch eine in der Stoffdatenbank vorgehaltene Sammlung von 4700 Stoffen (Auszug aus dem Chemikalienkatalog der Fa. Merck) erleichtert wird. Identifikationsmerkmale sind Summenformel, Verbindungsname, CAS-Nummer und optional eine weitere Bezeichnung, etwa ein Trivialname. Drei Plätze für Kürzel von funktionellen Gruppen geben eine weitere chemische Information. Neue Stoffe, für die die genannten Daten und die nachfolgend angegebenen Sicherheitsdaten von Hand eingegeben werden müssen, werden nach der Eingabe automatisch in die Datenbank aufgenommen, für die alphabetische Sortierung kann ein relevanter Anfangsbuchstabe gewählt werden. Als Sicherheitsdaten sind zwei Gefahrenkennbuchstaben (drei wären korrekt), die R- und S-Sätze sowie die (obsoleten) Giftklassen vorgesehen. Weiterhin gibt es als E-Sätze bezeichnete spezifische Entsorgungshinweise, deren Codenummern und Beschreibungen ebenso wie die typisch modifizierten R- und S-Codierungen identisch mit denen im Chemikalienkatalog der Fa. Merck sind. Weitere Felder für Sicherheitsdaten gibt es nicht. Anschließend können der Gebindegröße angepaßte Etiketten ausgedruckt werden, die den Verbindungsnamen, die Gebindenummer, den Standort, die Arbeitskreisbezeichnung mit Mitarbeiternummer, die R,S,E-Codes sowie mit der Gefahrenbezeichnung versehene Felder zum Aufkleben der Warnsymbole enthalten. Im SaferChem-Konzept müssen alle Gebinde des Arbeitskreises mit solchen Etiketten versehen sein. Damit der Arbeitskreis stets ein aktuelles Chemikalienverzeichnis besitzt, sieht das Programm Fristen für regelmäßige Inventuren vor; änderbar voreingestellt sind 12 Wochen für Arbeitsplätze und 52 Wochen für Lager. Säumige Mitarbeiter können vom Supervisor anhand protokollierter Arbeitssitzungen leicht ausgemacht werden. Das allorts bekannte Phäno-

men der Wanderung von Gebinden von Labor zu Labor haben die Autoren in ihrem Programm originell gelöst, was allerdings die Disziplin der Mitarbeiter fordert.

Aus den gespeicherten Daten lassen sich der Gesamtbestand oder Teilbestände von Arbeitsplätzen usw. als Liste ausdrucken. Ebenso kann sich jeder Mitarbeiter rasch über das Vorhandensein und den Standort einer Chemikalie sowie über deren Gefahreneigenschaften informieren. Unnötige Mehrfachbestellungen können so vermieden werden. Gelöschte Eintragungen werden in einer eigenen Datei gespeichert, so daß sich das ehemalige Vorhandensein eines Stoffes mitarbeiter- und arbeitsplatzbezogen zurückverfolgen läßt. Insgesamt können vom Programm bei langfristiger Nutzung bis zu 10^6 Gebinde verkraftet werden. Es gibt eine Reihe von Abfragemöglichkeiten aus der Stoffdatenbank nach gespeicherten Parametern. Suchen nach einigen voreingestellten Kombinationen, z. B. nach funktionellen Gruppen, lassen sich mit logischen Verknüpfungen durchführen, eine Suche nach frei wählbaren Kombinationen wäre wünschenswert. Diese Abfragen liefern durchweg Listen aus *allen* gespeicherten relevanten Verbindungen, also auch aus den voreingestellten 4700 Stoffen. Die *tatsächlich* als Gebinde vorhandenen Stoffe sind hierin zwar gekennzeichnet, aber nicht in einer separaten Liste extrahierbar. Somit ist z. B. der Ausdruck eines Gefahrstoffverzeichnisses ohne nachträgliches, mühevolleres Editieren nicht möglich. Nach Rücksprache mit der Verlagsredaktion werden die Autoren dies in einem Update ändern. Dann sollten auch Teilgefahrstofflisten der Laboratorien erstellt werden können.

Das auf dBase beruhende und unter MS-DOS laufende Programm erklärt sich aufgrund einer leichtverständlichen Menüführung im wesentlichen selbst. Der als Mindestanforderung angegebene IBM-kompatible PC mit 80386 CPU und 4 MB Arbeitsspeicher arbeitet zwar einwandfrei, ist aber entschieden zu langsam; mit der empfohlenen Ausstattung (80486 CPU, 8 MB Arbeitsspeicher, schnelle Festplatte, 2 MB-Cache) kann man hingegen flott arbeiten. Mit dem Programm kann nur an einem PC gearbeitet werden; Dateien können exportiert (z. B. in eine übergeordnete Datenbank), aber nicht (ohne weiteres) importiert werden. Eine netzfähige Version sollte angesichts der heute fast überall vorhandenen Voraussetzungen von den Autoren in Erwägung gezogen werden.

Bezüglich der Sicherheitsdaten beschränkt sich SaferChem auf die Mindest-

anforderung der Kennzeichnung von Chemikaliengebunden in Laboratorien (GefStoffV § 23, Nr. 3). Vom hierarchisch berechtigten Programmsupervisor können sämtliche vorhandenen Datensätze geändert oder neue hinzugefügt werden. Damit ist problemlos z. B. für Änderungen im R,S-Satz-Gefüge und für neue Gefahrenkennungen vorgesorgt. Bei Einhaltung der von den Autoren vorgeschlagenen Logistik ergeben sich weitere nicht zu unterschätzende Pluspunkte für die Arbeitssicherheit: Ordnung an den Arbeitsplätzen, Sorgfalt beim Umgang mit Chemikaliengebunden und, wenn die vorgeschlagenen Änderungen implementiert sein werden, eine geeignete Dokumentation für die Aufsichtsbehörde. Dankbar ist zu vermerken, daß es sich um ein Programm von Chemikern für Chemiker handelt. Für nicht zu große Arbeitskreise oder Unterabteilungen kann SaferChem als leicht bedienbares Ordnungsmittel bestens empfohlen werden. Voraussetzung ist die Bereitschaft des Arbeitskreisleiters, die Mitarbeiter darauf einzuschwören und ständig neu zu motivieren. Ohne die notwendige Disziplin wäre SaferChem sonst nur ein Spielzeug, dessen digitales Innenleben allmählich in einem Dornröschenschlaf versinken würde.

Andreas Merz

Institut für Organische Chemie
der Universität Regensburg

Tactics of Organic Synthesis. Von Tse-Lok Ho. Wiley, Chichester, 1994. 450 S., geb. 49.50 £. – ISBN 0-471-59896-8

Als jüngsten Sproß einer Reihe von mittlerweile fünf Monographien zur modernen Organischen Synthese präsentiert Tse-Lok Ho sein neuestes Werk mit dem Titel „Tactics in Organic Synthesis“. Dabei ist sein selbsterklärtes Anliegen, anhand ausgewählter Beispiele einen einheitlichenden Überblick über Synthesetaktiken zu geben. Der Begriff „Taktik“ läßt sich somit als die geschickte Anwendung einer oder mehrerer Einzelreaktionen im Rahmen eines Gesamtkonzeptes („Strategie“) verstehen.

Das Buch ist in neun Kapitel unterteilt, die die Themen Konvergenz, Schutzgruppen, Umpolung, Tandemreaktionen, cyclische Verbindungen, intramolekulare Reaktionsführung, Templat- und Chelateffekte, Symmetrieüberlegungen sowie Verschiedenes behandeln. In den einzelnen Kapiteln wird ein breites Arsenal von Taktiken und Methoden diskutiert, die in dieser komprimierten Form wohl kaum

sonstwo zu finden sein dürften. Nahezu jede Naturstoffklasse taucht in irgendeinem Zusammenhang einmal auf, und nahezu jeder wichtige Sachverhalt zur regio- und stereoselektiven Lenkung einer Reaktion wird irgendwo angesprochen. Trotz der Kapiteleinteilung bleibt der Inhalt allerdings heterogen, und man ist sich beim Lesen bisweilen nicht bewußt, in welchem Abschnitt man sich gerade befindet. Angesichts des umfangreichen Materials (ca. 1400 Literaturangaben) läßt sich schwerlich an der Auswahl Kritik üben, wenngleich es fast zwangsläufig vorkommt, daß man selbst ein anderes Beispiel für wichtiger oder instruktiver gehalten hätte. Unglücklich scheint mir die nahezu ausschließliche Beschränkung auf Zitate aus der Primärliteratur, derentwegen zahlreiche wichtige Übersichten gar nicht oder erst nach längerem Suchen erschlossen werden können. Die Literaturhinweise folgen im Text dem allgemeinen System [Nachname des in der Publikation erstgenannten Autors, Jahr] und korrespondieren mit einem Anhang der vollständigen Zitate am Ende des Buches. Ein Autorenregister existiert leider nicht. Anhand von etwa 150 willkürlich überprüften Literaturstellen erwiesen sich die Angaben als überwiegend verläßlich. Lediglich bei drei Beispielen waren die Jahreszahlen nicht stimmig. Eine Textstelle [B. A. Anderson, 1992] (S. 264) fehlte im Anhang, eine andere wurde nicht korrekt zitiert [J. Davies, 1981] (S. 14). In einigen Fällen vermißt man die Literaturangabe im Text, z. B. bei Nicolaous Arbeiten zu den Endiandrin-säuren (S. 97). Das Beispiel zur Chelatkontrolle (S. 78) habe ich in der angegebenen Quelle [Masuyama, 1988] nicht gefunden. Die Druckfehler halten sich in Grenzen und sind selten so sinnentstellend wie das „tierische Intermediat“ auf S. 244 („animal“ statt „aminal“). Deutschsprachige Autoren bleiben fast zwangsläufig nicht von Verstümmelungen ihres Namens verschont (Hoffman, S. 416; Oppenaur, S. 81; Kauffman, S. 419, Vorbrügen, S. 206). Beim Korrekturlesen hätten Sätze wie „reactions... are under chelation control in THF, but not in THF“ (S. 309) eliminiert werden müssen.

Inhaltlich ist das Buch nach einem einheitlichen Muster aufgebaut. Der Autor beschreibt zuerst in ein paar Sätzen ein taktisches Manöver an einem Molekül, und dann folgt zur Erklärung ein Formelschema, das das Geschriebene illustriert. Derartige Schemata (ca. 800) machen einen Großteil des Buches aus und wurden vorwiegend an Hand der Originalpublikationen in einheitlicher Form nachgezeichnet. Die Erläuterungen, die ohne zugehörige Abbildung gemacht werden, sind