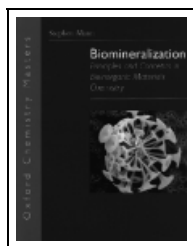




## Biom mineralization



Principles and Concepts in Bioinorganic Materials Chemistry. Von Stephen Mann. Oxford University Press, Oxford 2001. 210 S., Broschur 24.95 £.—ISBN 0-19-850882-4

Das Gebiet Biom mineralisation liegt im Schnittbereich von Chemie, Biologie, Medizin und Materialwissenschaften. Es geht dabei um die biologische Verwendung von anorganischen Festkörpern zu unterschiedlichen Zwecken, z. B. als Knochen oder Zahn (Calciumphosphat), Schale (Calciumcarbonat in Muscheln und Schnecken) oder Schutz vor Fressfeinden (Kieselsäure in Reis oder Schachtelhalmen). In den letzten Jahren hat dieses Gebiet zunehmend Interesse auch seitens der Chemie erfahren, da die Prinzipien der Biom mineralisation bis heute nur wenig verstanden sind. Wie macht eine Schnecke ihre Schale, wie entsteht ein Zahn? Können Materialwissenschaftler das auch? Bis heute offene Fragen!

Diesem Umstand trägt auch das von der Deutschen Forschungsgemeinschaft kürzlich eingerichtete Schwerpunktprogramm „Prinzipien der Biom mineralisation“ Rechnung. Leider gibt es auf dem Markt kein einführendes Lehrbuch zu diesem Gebiet, das ggf. auch vorlesungsbegleitend verwendet werden kann. Die verfügbaren Monographien *Biom mineralization* (Bäuerlein, 2000) und *On Biom mineralization* (Lowenstam, Weiner, 1989) sind für den grundlegenden Ein-

stieg bereits zu speziell bzw. zu umfassend. Aus diesem Grund ist der Neuling auf diesem Gebiet auf mehr oder weniger gut verständliche Übersichtsartikel angewiesen.

Das vorliegende Buch von Stephen Mann, einer international anerkannten Kapazität auf diesem Gebiet, versucht, diese Lücke zu schließen. In gut lesbarer Form werden die Grundlagen erläutert und an (oft eigenen) Beispielen veranschaulicht. Das Werk ist reichlich mit Bildern, Tabellen und Schemata versehen, die das Verständnis erleichtern. Die Vermittlung des Stoffs ist eher chemisch-materialwissenschaftlich als biologisch-medizinisch geprägt: Man findet also keine systematische Behandlung der einzelnen biologischen Arten und der dort stattfindenden Biom mineralisation, sondern das Thema wird anhand der Spezies-übergreifenden molekularen und physikochemischen Grundprinzipien dargestellt, und in dieser Form ist das Buch auch gegliedert.

Nach einer kurzen Einführung in die Problematik folgt ein Kapitel über die bisher bekannten Biom mineralien und deren Funktion. In den folgenden Kapiteln werden die Prinzipien vorgestellt. Im Kapitel über die chemische Kontrolle der Biom mineralisation findet man Grundlegendes zur Löslichkeit, zur Kristallisationstheorie und zu Festkörpern. In den Kapiteln über Biom mineralisation an Grenzflächen und in Vesikeln, Struktur und Wirkung der organischen Matrix sowie Morphogenese (Formgebung) werden detailliert die bei der Biom mineralisation ablaufenden Prozesse behandelt, insbesondere die Wechselwirkung zwischen organischen bzw. biologischen Templaten und kristallisierenden anorganischen Festkörpern. Im Kapitel „Biom mineral tectonics“ (für diesen vom Autor geprägten Begriff gibt es noch keine gute deutsche Übersetzung) wird die Zusammenfügung der einzelnen Bausteine zu größeren Objekten, hier demonstriert an den Beispielen von Knochen und Kalkalgenskeletten, so genannten Coccolithen, beschrieben.

Den Abschluss des Buches bildet ein Kapitel zur „biologisch inspirierten Materialsynthese“. Hier wird gezeigt, wie die aus der Biologie entnommenen Mechanismen zur Herstellung von „neuen Materialien“ eingesetzt werden können. Grundlegend ist auch hier die

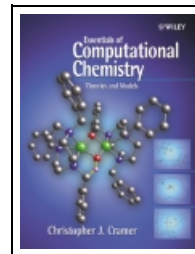
Wechselwirkung von anorganischen Werkstoffen während der Kristallisation mit organischen oder biologischen Templaten. So kann man Nanopartikel in Vesikeln kristallisieren, Calciumcarbonat unter Monoschichten kristallisieren und in Mikroemulsionen besondere Kristallmorphologien erzeugen. Das Potenzial solcher „sanfter“ Methoden ist sicher noch lange nicht ausgeschöpft. Beim Studium der aktuellen materialwissenschaftlichen Literatur fällt die Fülle diesbezüglicher Arbeiten auf.

In dem vorliegenden Werk lässt sich gut „schmökern“, da der Schreibstil locker und gut verständlich ist. Für den wohl meist in Eile befindlichen Leser ist die kurze, kursiv gedruckte Zusammenfassung der wesentlichen Gedanken am Ende der einzelnen Absätze interessant. Dies ermöglicht eine schnelle Übersicht, ohne sich in Details zu verlieren. Jedes Kapitel wird mit einer Liste weiterführender Literatur (oft Übersichtsartikel) abgeschlossen. Das Lesen wird durch eingestreute Anekdoten und wissenswerte Nebenaspekte aufgelockert. Wussten Sie, dass manche Hefearten in der Lage sind, die Kristallisation von Halbleiter-Quantenpunkten (CdS) zu induzieren?

*Biom mineralization* ist ein schönes Buch, das eine Lücke auf dem Buchmarkt schließt. Es kann allen Neueinsteigern und auch allen auf diesem Gebiet tätigen Forschern nur empfohlen werden.

Matthias Eppe  
Anorganische Chemie  
Universität Bochum

## Essentials of Computational Chemistry



Theories and Models. Von Christopher J. Cramer. John Wiley & Sons Ltd., New York 2002. 542 S., Broschur 32.50 £.—ISBN 0-471-48552-7

*Essentials of Computational Chemistry* ist in gewisser Hinsicht das fehlende

Glied, das in die Lücke zwischen der Ausbildung von Studierenden und der Weiterbildung von Akademikern auf dem Gebiet Theoretische Chemie passt. Es ist die ausgewogene Mischung von mathematischer Strenge, Interpretation und erschöpfender Behandlung, die dieses Lehrbuch so einmalig macht, besonders aus der Sicht der Hauptzielgruppe des Buches: fortgeschrittene Studierende und Doktoranden mit Grundkenntnissen in Quantenmechanik (QM) und statistischer Mechanik. Auch Chemiker in der Praxis, die eine gut lesbare Einführung in das Thema suchen, werden dieses Buch zu schätzen wissen. Allen genannten Gruppen ist dieses Lehrbuch der Theoretischen Chemie wärmstens zu empfehlen.

Im einleitenden Kapitel 1 werden die grundlegenden Konzepte dargestellt und die in den folgenden Kapiteln verwendete Nomenklatur eingeführt. In den Kapiteln 2–8 werden alle wesentlichen theoretischen Methoden, von der klassischen Molekülmechanik (MM) und Moleküldynamik (MD) über semiempirische Methoden und die Hartree-Fock(HF)-Theorie bis zur Elektronenkorrelation in anspruchsvollen Ab-initio-Rechnungen und Dichtefunktionaltheorie (DFT) abgehandelt. Nicht nur, aber besonders hier zeigt sich die hohe didaktische Qualität dieses Lehrbuchs. Die genannten Methoden bilden den Kern vieler Lehrveranstaltungen über theoretische Chemie, und ich bin der Meinung, dass Studierende nicht nur *wissen* sollten, welche Methode für ein bestimmtes Problem gut geeignet ist, sondern auch *verstehen* sollten, warum dies so ist. Cramer vermittelt dieses Verständnis, indem er sich auf Grundkonzepte konzentriert und zu deren Erklärung die Mathematik und Physik in genau dem richtigen Maß ins Spiel

bringt, anstatt auf jegliche mathematische Ausführungen zu verzichten. Er führt den Leser klar und zusammenhängend durch die Schlüsselgleichungen, stellt diese in den Zusammenhang und bietet wichtige Hintergrundinformationen. Die Leistung (Genauigkeit und Rechenaufwand) der verschiedenen Methoden wird miteinander verglichen und beurteilt, und die typischen technischen und praktischen Probleme (z. B. die Konvergenz von SCF und Basissatz) werden diskutiert.

In den Kapiteln 9–12 werden unter anderem die Ladungsverteilung, spektroskopische Eigenschaften (z. B. Hyperpolarisierbarkeit, ESR- und NMR-Parameter), die Berechnung thermodynamischer Größen und Lösungsmittelleffekte behandelt. Die letzten drei Kapitel (13–15) sind QM/MM-Hybridverfahren, der Berechnung von angeregten Elektronenzuständen (z. B. mit zeitabhängiger DFT-Rechnung) und der adiabatischen Reaktionsdynamik gewidmet. Die meisten Kapitel schließen mit einer Fallstudie ab, die die Umsetzung der Theorie in die Praxis und den Einsatz der besprochenen Modelle veranschaulicht. Anwendungen aus der anorganischen und organischen Chemie sowie der Biochemie werden vorgestellt. Die Themen sind anhand des ausführlichen Stichwortverzeichnisses und des übersichtlichen Inhaltsverzeichnisses leicht zugänglich.

Bei der Angabe der wenigen Mängel beschränke ich mich auf zwei Beispiele: Die Behauptung auf Seite 238, dass das Variationsprinzip für den Erwartungswert eines vorläufigen Hamilton-Operators für eine vorläufige Wellenfunktion gilt, ist falsch, denn es gilt nur für den exakten Hamilton-Operator. Auch die Feststellung auf Seite 526, dass alle natürlichen Atomorbitale (NAOs)

durch primitive Atomorbitale eines einzigen Atoms beschrieben werden, stimmt nicht, da NAOs verschiedener Atome orthogonal zueinander sind und somit Beiträge der primitiven Atomorbitale des anderen Atoms enthalten. Ein mehr allgemeiner Kritikpunkt ist, dass die Analyse und die Interpretation der elektronischen Struktur und der Bindung etwas vernachlässigt werden. Obwohl das Buch eine gute Einführung in die verschiedenen Rechenmethoden bietet, wobei ihre Stärken und Schwächen sehr gut herausstellt und erläutert werden, fehlt doch die Verdeutlichung der unschätzbaren vereinheitlichenden Kraft chemischer Konzepte und Theorien, die sich aus genauen Elektronenstrukturanalysen ableiten. Aus pädagogischer Sicht ist dies eine verpasste Gelegenheit. Zwar ist jede negative Kritik bedauerlich, aber meiner Meinung nach wiegen die oben genannten bemerkenswert positiven Qualitäten des Buchs diese mehr als auf.

Insgesamt gesehen ist *Essentials of Computational Chemistry* ein hervorragendes Lehrbuch, das die Lücke zwischen einer Einführung in die Quantenmechanik und speziellen Lehrbüchern der Theoretischen Chemie optimal ausfüllt. Der Autor hat die ideale Mischung von mathematischen Grundlagen, didaktisch gelungenen Erklärungen fundamentaler Konzepte und veranschaulichenden Anwendungsbeispielen gefunden. Alle Anzeichen deuten darauf hin, dass dieses Buch zu einem Bestseller auf seinem Gebiet wird.

F. Matthias Bickelhaupt  
Afdeling Theoretische Chemie,  
Scheikundig Laboratorium  
der Vrije Universiteit, Amsterdam  
(Niederlande)