



Elemente der Syntheseplanung



Von Reinhard W. Hoffmann. Spektrum Akademischer Verlag, Heidelberg 2006. 202 S., geb., 29,50 €. — ISBN 3-8274-1725-2

Zum Thema Syntheseplanung sind bereits einige Monographien erschienen; erwähnt seien *Organic Synthesis. The Disconnection Approach* von S. Warren und natürlich *The Logic of Chemical Synthesis* von E. J. Corey. Das nun erschienene Buch R. W. Hoffmanns setzt ganz eigene Schwerpunkte und ist vermutlich aus einer gerne gehaltenen Vorlesung hervorgegangen, jedenfalls spürt man die Begeisterung des Autors für sein Thema – und das nicht nur im elften und letzten Kapitel „Kunstgenuss“.

Schon der Titel – wie übrigens auch jeglicher Inhalt – ist exakt und offenbar sehr bewusst gewählt, denn die Grundlagen, die Bausteine der Syntheseplanung, also Retrosynthese und Synthesekonzepte und wiederum deren Bestandteile, werden auf äußerst systematische Weise vorgestellt und in grauen Kästen nochmals übersichtlich zusammengefasst. In der Einleitung werden Grundbegriffe wie Retrosynthese/reconnection und Bindungssatz/bond set erklärt, wobei von wichtigen Fachbegriffen auch die englische Terminologie angegeben ist. Außerdem wird ein Überblick über den Komplex Syntheseplanung gegeben, bevor dem Leser in

den folgenden Kapiteln das nötige Rüstzeug vermittelt wird.

Den Hauptteil des Buches bilden die Kapitel 2–6, in denen Wege zu sinnvollen Bindungssätzen aufgezeigt werden, die an funktionellen Gruppen, am Molekülgerüst, an Bausteinen und an Methoden orientiert sind. So gibt es Abschnitte über *a*“- und *d*“-Synthons (immer auch mit Beispielen aus der Praxis), Umpolung, 1,*m*-Abstände zweier Funktionalitäten, FGA-Strategie (Addition einer funktionellen Gruppe), Symmetrie im Molekülskelett und Ex-Chiral-Pool-Synthesen. Besonders hervorgehoben wird der Aufbau cyclischer Strukturen in Kapitel 6, in dem unter anderem Diels-Alder-Reaktionen, *exendo*-Bindungen, Verbrückungen und „überzüchtete Skelette“ besprochen werden. Die Reihenfolge, mit der die Bruchstücke des Bindungssatzes verknüpft werden, wird in Kapitel 7 und 8 behandelt. Hier werden außerdem Schutzgruppen klassifiziert und Synthesepäne bewertet. Der Fokus liegt somit auf dem Aufbau des Molekülgerüsts, während Transformationen von funktionellen Gruppen sinnvollerweise zusammen mit anderen Themen behandelt werden. Dem Aufbau stereogener Zentren ist Kapitel 10 gewidmet.

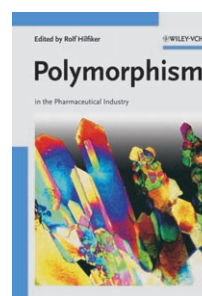
In Kapitel 11 werden bemerkenswerte Synthesen von Naturstoffen vorgestellt, wobei auf Ausbeuteangaben verzichtet wurde. Die umfangreichen Reaktionsschemata sind zumeist sehr übersichtlich gestaltet und werden nur ansatzweise erläutert, um den Leser selbst denken und Erlernes wiederholen zu lassen, wobei Inhaltsverzeichnis und Index nützliche Hilfsmittel sind. Die Synthesen stammen aus der Zeit zwischen 1959 und 2005 und bestechen durch zeitlosen Einfallsreichtum. Trotz Hoffmanns Bedauern darüber, dass sich die Syntheseplanung „auf dem Wege von einer Kunst zu einer Technik“ befindet, widmet er der rechnergestützten Syntheseplanung ein eigenes Kapitel und weist mehrfach auf Internetseiten hin, in denen nach bekannten Transformationen gesucht oder die genannten Syntheseplanungsprogramme gefunden werden können (Kap. 9).

Nicht allein für Rezensenten ist es angenehm, ein Buch zu lesen, das sich auf das Wesentliche beschränkt. Dem Autor ist es gelungen, in einem 202-sei-

tigen, handlichen Buch das Thema Syntheseplanung umfassend und didaktisch geschickt abzuhandeln. Die kurzen, prägnanten Kapitel sind hoch systematisch, und beinahe jeder Sachverhalt ist mit Literaturbeispielen belegt. Leider sind die Strukturformeln in wenigen Fällen etwas nachlässig gezeichnet. Da Abkürzungen von Schutzgruppen, Liganden und Molekülteilen sowie das Erkennen gleich mehrerer Reaktionsstufen vorausgesetzt werden, ist dieses Lehrbuch vor allem für fortgeschrittene Studenten und Doktoranden geeignet. Es ist leicht zu lesen und macht Lust auf Synthese. Außerdem kann es als Nachschlagewerk verwendet werden, wenn man vor ein Syntheseproblem gestellt ist, und auch Dozenten dürften es gerne zur Vorlesungsvorbereitung zur Hand nehmen. Trotz starker Konkurrenz wird dieses leidenschaftlich geschriebene Buch eine weite Verbreitung finden und noch so manche Auflage erleben.

Niklas Schöne
Forschungszentrum Jülich

Polymorphism in the Pharmaceutical Industry



Herausgegeben von Rolf Hilfiker. Wiley-VCH, Weinheim 2006. 414 S., geb., 149,00 €. — ISBN 3-527-31146-7

Noch vor Jahren kaum beachtet, ist die Polymorphie chemischer Substanzen mittlerweile ein hoch aktuelles Thema, vor allem in der Pharmaindustrie, wo man die Polymorphie als wichtige Einflussgröße in der Wirkstoffentwicklung, aber auch in Zulassungs- und Patentierungsverfahren gezwungenermaßen zur Kenntnis nehmen musste. Das vorliegende Buch kann sowohl Einsteigern als Lehrbuch zur pharmazeutischen Poly-

morphie dienen, erfüllt aber auch seinen Zweck als ausführliche Monographie. Die meisten Kapitel enthalten zahlreiche Hinweise auf die wichtigsten Originalarbeiten und Übersichtsartikel, sodass jederzeit ein tieferer Einstieg in ein bestimmtes Thema möglich ist.

In den insgesamt 15 Kapiteln werden vielfältige Themen behandelt, die von thermodynamischen Grundlagen bis hin zu patentrechtlichen Aspekten reichen (der speziellen Problematik bei Zulassungs- und Patentierungsverfahren sind zwei Kapitel des Buches gewidmet). Der eng gefasste Titel wird diesem sehr breiten Themenspektrum allerdings nicht gerecht, da neben „echten“ polymorphen Stoffen auch Solvate und Salze diskutiert werden, wobei die Kapitel über Solvate und hygroskopisches Verhalten ausgesprochen wertvoll sind. Gut vorstellbar, dass damit manch potenzieller Leser verloren ging.

Die meisten der Kapitel – die alle von anerkannten Fachleuten verfasst wurden – beschäftigen sich mit Festkörpern. Wie bei fast allen Monographien sind Abstriche bezüglich einer einheitlichen Präsentation zu machen, worunter der gute Gesamteindruck des Buches etwas leidet. So werden z. B. im 44-seitigen Kapitel über Schwingungsspektroskopie umfangreich die verschiedenen spektroskopischen Techniken erklärt, während auf Polymorphie erst in der zweiten Hälfte des Textes eingegangen wird. Andererseits wird die Festkörper-NMR-Spektroskopie, die eine sicher informativere und vielseitigere Methode ist als die Schwingungsspektroskopie, auf weniger als 15 Seiten abgehandelt, wobei die Grundlagen in nur einem Abschnitt erläutert werden. Obgleich alle Kapitel interessant und nützlich sind, wirkt die Darstellung des Stoffs etwas lückenhaft. Zum Beispiel wäre ein Kapitel über Kristallisationskinetik als Ergänzung zum Kapitel über die Thermodynamik der Kristallisation angebracht gewesen. Dort werden zwar kinetische Aspekte kurz angesprochen, aber Themen wie Kristallwachstum, Ostwald-Reifung, Lösungsmiteinfluss, Kristallmorphologie oder Kinetik der Festphasenübergänge werden nicht ausreichend erörtert. Außerdem ist zu bemängeln, dass auf quantenmechanische Modellrechnungen zur Polymor-

phie – ein Gebiet, auf dem in letzter Zeit große Fortschritte erzielt wurden – nicht eingegangen wird.

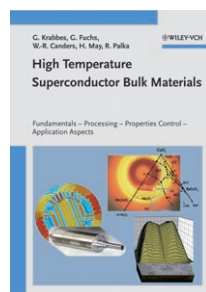
Die Texte sind gut geschrieben und mit nützlichen Abbildungen versehen. Das Sachwortverzeichnis ist ausführlich und hilfreich, während das Inhaltsverzeichnis einen klaren Überblick bietet. Trotz obiger Kritik ist dem Buch ein großer Leserkreis zu wünschen, und vor allem für Studierende wird die Lektüre ein großer Gewinn sein, da in den meisten Grundvorlesungen der Chemie das Thema Polymorphie ausgelassen wird. Darüber hinaus ist es Wissenschaftlern in der pharmazeutischen Industrie und an Hochschulen, die sich für die Charakterisierung organischer Festkörper interessieren, sehr zu empfehlen.

Robin K. Harris

Department of Chemistry
University of Durham (Großbritannien)

DOI: 10.1002/ange.200685424

High Temperature Superconductor Bulk Materials



Von Gernot Krabbes, Günter Fuchs, Wolf Rüdiger Canders, Hardo May und Ryszard Palka.
Wiley-VCH, Weinheim 2006. 299 S., geb., 99.00 €.— ISBN 3-527-40383-3

Seit der Entdeckung der Hochtemperatur-Supraleitung (HTSL) durch Bednorz und Müller ist die Materialforschung an Cuprat-Verbindungen und die Umsetzung dieser Materialien in supraleitende Funktionseinheiten ein aktuelles Arbeitsgebiet der angewandten Supraleitung. In diesem Buch werden Cupratmaterialien behandelt, wobei der Schwerpunkt bei schmelztexturierten $\text{LnBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ -Verbindungen liegt (Ln = Y, Nd, Sm, Eu, Gd, Dy). Die Autoren spannen den Bogen von der Materialherstellung (Physik und Chemie) über die supraleitenden Eigenschaften (Physik) zu den technischen

Anwendungen (Ingenieurwissenschaften) bis hin zu den Funktionsmodellen und Prototypen, die mit Hochtemperatur-Supraleitermaterialien realisiert worden sind (Ingenieurwissenschaften). Eine solch breite und umfassende Darstellung, die sowohl Grundlagen als auch Anwendungen abdeckt, findet sich selten und ist deshalb besonders nützlich.

Wegen der Fülle des Materials gehen die Autoren pointiert vor, und häufig wird auf Übersichtsartikel verwiesen, die die notwendigen Detaildarstellungen enthalten. Das Buch ist als klassisches Fachbuch aufgebaut und enthält weder digitale Datenträger noch Übungsaufgaben oder Anhänge. Um die behandelte Thematik verstehen zu können, sollte man mit den Grundlagen der Supraleitung und der Thermodynamik von Phasenbildungen bereits vertraut sein. Der Inhalt des Buches ist trotz der breiten Darstellung über das Inhaltsverzeichnis gut zugänglich.

Das Buch beginnt mit detaillierten Ausführungen zur Materialherstellung anhand zahlreicher Phasendiagramme, die für ein Verständnis der thermodynamischen Prozesse unverzichtbar sind. Die im Herstellungsprozess auftretenden Phasen spielen eine maßgebliche Rolle für die Gefügebildung. Auf die Nichtstöchiometrie der $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ -Supraleiterphase wird ausführlich eingegangen, und an dieser Stelle hebt sich das Buch positiv von anderen, vor allem physikalisch orientierten Fach- und Lehrbüchern ab. In einem eigenen Kapitel wird anhand von Mikrostrukturbildern im Raster- (REM) und Transmissionselektronenmikroskop (TEM) aufgezeigt, dass die Immobilisierung (Verankerung) von magnetischen Flusslinien in $\text{LnBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-x}$ maßgeblich von ausgedehnten Kristallbaufehlern, d. h. Ausscheidungen, Versetzungen und Stapelfehlern, abhängt. Ein weiteres Kapitel diskutiert die Physik des Vortextzustandes (insbesondere die Ausbildung magnetischer Flusslinien, die kritische Stromdichte und die Flusslinienverankerungskraft), das Phänomen des Flusskriechens sowie die mechanischen und plastischen Eigenschaften des Supraleitermaterials. Es wird erklärt, dass Anwendungen von HTSL-Materialien eine genaue Steuerung nicht nur der supraleitenden Ei-