

auch Physikern berücksichtigen.“ Man könnte dieses Konzept auch auf wissenschaftliche Ansätze übertragen – mit dem Experiment auf der einen, der Theorie auf der anderen Seite. Das Experiment liefert Daten, aus denen Theorien entwickelt werden, die verifiziert, modifiziert oder verworfen werden. Umgekehrt liefert die Theorie Hypothesen für weitere Experimente. Werden Wissenschaftler auch gewöhnlich in „Experimentatoren“ oder „Theoretiker“ eingeteilt, so sind es oft genug die Praktiker, die neue Theorien formulieren, und die Theoretiker, die neue Experimente vorschlagen. Mehr noch ändern sich die Zeiten, da immer mehr Wissenschaftler Experiment und Theorie kombinieren, indem sie computergestützt arbeiten.

Ziel vorliegenden Buches ist es, Chemikern, Physikern und Materialwissenschaftlern eine allgemeine Grundlage für theoretische Untersuchungen und Berechnungen von Festkörpern zu vermitteln. Der sauber verfasste Text beginnt mit einer Einführung zu klassischen und quantenmechanischen Theorien, geht dann über zu Beschreibungen von Rechenmethoden und schließt mit zahlreichen Beispielen aus den eigenen Arbeiten des Autors, die auf Struktur (auch Strukturvorhersage), Zusammensetzung, physikalische Eigenschaften und thermodynamische Daten von Festkörpern eingehen. Das Buch ist hervorragend geschrieben und ermöglicht auch Studierenden und Wissenschaftlern, die mit Festkörpertheorien wenig vertraut sind, einen leichten Einstieg in das Gebiet. Spezialisten werden den Ideenreichtum der breitgefächerten Thematik für eigene Denkanstöße zu nutzen wissen.

In Kapitel 1 werden klassische, vorrangig chemieorientierte Grundlagen erläutert: Atom- und Ionenradien, Ionenmodell der chemischen Bindung, Pauling-Regeln, Bindungsvalenzmethoden und Volumeninkremente. Besonders hilfreich sind hier die Tabellen mit Daten chemischer Elemente.

Grundlagen der Quantenmechanik stehen in Kapitel 2 im Mittelpunkt. Unter anderem werden die Prinzipien des Molekülorbitalansatzes für kristalline Festkörper erklärt, wobei die Mathematik auf das Notwendigste beschränkt bleibt und viele Abbildungen

den Stoff anschaulich machen. Es folgen Erläuterungen zur Erzeugung von Zustandsdichten, zur Gesamtenergiezerlegung und zu Überlappungsdichten. Weiter geht es mit Austausch- und Korrelationsphänomenen, Dichtefunktionaltheorie, Pseudopotentialen, Zellmethoden, linearen Methoden und Moleküldynamik. Am Schluss des Kapitels findet sich ein wichtiger Abschnitt, der die einschlägigen Computeranwendungen zusammenfasst.

Im Kapitel 3 werden schließlich Anwendungen der zuvor erläuterten Methoden anhand vieler praktischer Beispiele geschildert. Das Kapitel beginnt mit der Optimierung und Erläuterung von Metalloxi- und Metallnitridstrukturen, im weiteren Verlauf werden dann Strukturverzerrungen in Elementen wie Tellur erklärt, magnetische Eigenschaften von Übergangsmetallen und ihren Verbindungen beschrieben und Verbundstoffe mit Moleküldynamikmethoden charakterisiert. In einem Abschnitt über Carbodiimide und Cyanamide werden Grenzen und mögliche Fallstricke aufgezeigt. Das Kapitel schließt mit Strukturvorhersagen neuer Materialien wie Oxynitride, intermetallische Verbindungen und magnetische Materialien.

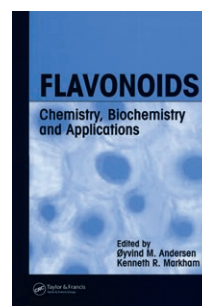
In den ersten beiden Kapiteln wird der Stoff auf sehr anschauliche Weise vermittelt, wobei sich mathematische Ausführungen und erläuternde Abbildungen gut ergänzen. Die Fallstudien in Kapitel 3 basieren vor allem auf der Verwendung von Bildmaterial. Eine reichhaltige und umfassende Bibliographie gibt dem interessierten Leser die Gelegenheit, intensiver in eine Thematik einzusteigen.

Computational Chemistry of Solid State Materials ist ein hervorragendes Handbuch für Studierende und Forscher, die sich mit Rechenmethoden für Festkörperuntersuchungen beschäftigen. Das Buch ist systematisch geordnet und bietet in verständlicher Weise Einblicke in die erläuterten Techniken. Roald Hoffmann kommt zu dem Schluss, dass „dieses Buch ... gleichsam ein Reisepass für kreative Exkursionen in dieses gemeinsame Gebiet [zwischen der Chemie und Physik] ist“. Zu alledem kommt dieses Buch genau zur rechten Zeit, denn da Rechenmethoden immer leichter zugänglich werden,

bedarf es einer gründlichen Erläuterung von Stärken und Schwächen der vielfältigen in Gebrauch befindlichen Modelle.

Gordon J. Miller
Department of Chemistry
Iowa State University, Ames (USA)

Flavonoids



Chemistry, Biochemistry and Applications. Herausgegeben von Øyvind M. Andersen und Kenneth R. Markham. CRC Press/Taylor & Francis 2006. 1237 S., geb., 249.95 \$.—ISBN 0-8493-2021-6

8150! Diese Ziffer markiert die Zahl der bekannten Flavonoide – und ein Ende ist nicht in Sicht. Praktisch alles, was man über Flavonoide wissen muss, ist in den 17 Kapiteln dieses 1237 Seiten starken Buches enthalten. Das Themenspektrum reicht von der Biogenese der Flavonoide, ihren Funktionen in Pflanzen bis hin zu Anwendungen in der Lebensmittelindustrie und Medizin. Die umfangreiche Sammlung von Beiträgen, die allesamt von Fachleuten auf dem jeweiligen Gebiet verfasst wurden, spiegelt die gesamte Chemie dieser Pflanzenmetabolite wider, wobei vor allem auf die Isolierung, Strukturbestimmung, physikochemischen Eigenschaften, Reaktivität und Synthese näher eingegangen wird.

Flavonoide sind sekundäre Naturstoffe, deren aromatischer C_6-C_3 -Baustein auf dem Shikimat/Phenylpropionat-Weg erzeugt wird, während der zweite aromatische C_6 -Baustein auf dem „polyketidischen“ Acetat/Malonat-Weg entsteht. Damit wird das $C_6-C_3-C_6$ -System auf eine kombinatorische Weise von den vielfältigen Enzymreaktionen der Pflanzen aufgebaut, wodurch die

unterschiedlichen Flavonoidklassen resultieren, darunter Flavone, Flavanone, Flavonole, Flavanole, Anthocyanidine und Isoflavone. In allen Verbindungen sind die beiden aromatischen C₆-Ringe in typischer Weise durch die C₃-Einheit zu einem 2-Phenylchromangerüst verbunden. Der Grad der Hydroxylierung, O-Methylierung und Oxidation/Dehydrierung sowie mögliche regio- und stereochemische Varianten und Konformere bedingen die bemerkenswerte Strukturvielfalt dieser Naturstoffe. Aber die Natur hat noch mehr zu bieten: Flavonoide können verschiedenartig glycosyliert sein, zu Oligomeren oder Polymeren reagieren, und – was hinsichtlich der Strukturvielfalt sehr wichtig ist – es können Ringöffnungen und Ringverengungen auftreten, die zu den Chalkonen bzw. Auronen führen. Die meisten, wenn auch nicht alle Flavonoide enthalten zwei Mono-, Di- oder Trihydroxyphenylgruppen und gehören deshalb zu den natürlichen Polyphenolen, die derzeit wegen ihrer vermuteten gesundheitsfördernden Wirkung für Schlagzeilen sorgen. Ursächlich für diese Wirkung sind die antioxidativen Eigenschaften der Flavonoide, die in fast allen pflanzlichen Nahrungsmitteln und Getränken wie Wein und Tee in nennenswerten Mengen vorkommen. Wer Genaueres erfahren möchte, der sollte dieses hervorragende Buch zur Hand nehmen. Es ist natürlich nicht das erste Buch über diese wichtige Naturstoffklasse, aber die letzte Monographie (von J. B. Harborne) liegt schon zehn Jahre zurück, und seither hat sich eine Menge getan.

Das ausgezeichnete, von A. Marston und K. Hostettmann verfasste Kapitel 1 dient schon für sich genommen als ein wertvolles Nachschlagewerk über Flavonoide. Die Extraktion, Trennung, Reinigung, Quantifizierung und Charakterisierung der Naturstoffe wird hier eingehend beschrieben. Besonders nützlich sind die Angaben über stationäre Phasen und Lösungsmittelsysteme für die chromatographische Trennung von Flavonoidunterklassen. Außerdem werden relevante analytische Methoden wie HPLC-MS, UV- und NMR-Spektroskopie vorgestellt.

Alle wichtigen spektroskopischen Techniken zur Charakterisierung von Flavonoiden werden im Kapitel 2 von T.

Fossen und Ø. M. Andersen detailliert beschrieben. Die Autoren beschäftigen sich vor allem mit NMR-Spektroskopie und Massenspektrometrie. Zahlreiche Tabellen mit praktischen Informationen einschließlich chemischen Verschiebungen in verschiedenen Lösungsmitteln und MS-Ionisationsmethoden sind vorhanden. Weiterhin werden Flavonoidanalysen mithilfe der Raman-Spektroskopie und zweidimensionaler IR-Spektroskopie erläutert. In Anbetracht des besonderen Interesses der Autoren für Anthocyane ist es keine Überraschung, dass sehr ausführlich über die UV/Vis-spektroskopische und kolorimetrische Charakterisierung dieser Pflanzenfarbstoffe berichtet wird. Besonders bemerkenswert ist die tabellarische Farbbeschreibung reiner Anthocyane, die auf den Spezifikationen der Commission International de l'Eclairage basiert.

In Kapitel 3 erörtern K. M. Davies und K. E. Schwinn aktuelle Forschungsergebnisse zur Biochemie der Flavonoide und zur Genetik des Sekundärstoffwechsels. Alle wichtigen Enzyme, die am Aufbau und der Diversifikation des Flavonoidgerüsts beteiligt sind und deren Gene oder cDNA bisher identifiziert wurden, werden vorgestellt. Ferner werden die Regulation der Genexpression und Versuche zur gentechnischen Veränderung der Flavonoid-Biosynthese erörtert.

Die folgenden vier Kapitel beschäftigen sich mit dem Vorkommen von Flavonoiden und anderen Phenolen und Polyphenolen in pflanzlichen Nahrungsmitteln und Getränken. Die Wirkung dieser Substanzen auf den menschlichen Organismus wird eingehend beschrieben. J. A. M. Kyle und G. G. Duthie präsentieren eine sorgfältig erstellte Datenbank mit in Nahrungsmitteln vorkommenden Flavonoiden und erörtern Faktoren, die den Gehalt an Flavonoiden in Nahrungsmitteln und deren Aufnahme mit der Nahrung beeinflussen. Ausführliche Informationen über Strukturen und Reaktionen von natürlichen und (bio)chemisch modifizierten Flavonoiden im Wein sowie über deren Bedeutung für die Farbe und den Geschmack des Weins findet man im Beitrag von V. Cheynier. In einem sehr interessanten Kapitel berichten M. Clifford und J. E.

Brown über die Bioverfügbarkeit von Flavonoiden und anderen pflanzlichen Phenolen sowie über deren gesundheitsfördernde Wirkungen, die über ihre Radikalfängereigenschaften hinausgehend vermutet werden. Allerdings sind auf diesem Gebiet noch viele Studien nötig, um die Zusammenhänge zwischen Ernährung und Gesundheit eindeutig aufzuzeigen. Mit dieser Thematik befasst sich auch H. Wiseman in ihrem Beitrag über Isoflavonoid-Phytoöstrogene wie Genistein, Daidzein und ihren im Soja vorkommenden Glycosid-Derivaten. Neben den reduzierenden (antioxidativen) Eigenschaften sind die Wechselwirkungen der Flavonoide mit Proteinen ein weiterer Forschungsschwerpunkt. Solche Wechselwirkungen spielen nicht nur bei vielen biologischen Reaktionen von Flavonoiden in Pflanzen eine Rolle, sondern sind auch in Hinblick auf Bioverfügbarkeit und biologische Aktivität im menschlichen Organismus wichtig. Diese Aspekte werden in Kapitel 9 von O. Dangles und C. Dufour eingehend diskutiert.

Warum produzieren Pflanzen überhaupt Flavonoide? Antworten auf diese elementare Frage findet man in Kapitel 8 von K. S. Gould und C. Lister. Zum einen dienen Flavonoide ihren Produzenten wahrscheinlich als Abwehrstoffe gegen Herbivore und Krankheitserreger, aber dies ist bei weitem nicht ihre einzige Aufgabe. Weitere Funktionen werden bei der Steuerung der Pflanzenreproduktion vermutet sowie beim Schutz gegen Stress, z. B. gegen UV-Strahlung und Schwermetalleinwirkung.

Die verbleibenden sieben Kapitel sind spezifischen Flavonoidklassen gewidmet, deren Chemie und Biologie mehr oder weniger ausführlich behandelt wird. Unter anderem wird auf Nomenklatur, Strukturen, Charakterisierungsmethoden, Reaktivität, physikalische Eigenschaften, Biosynthese und chemische Synthese, Vorkommen und die Verteilung in der Natur, Funktionen und Anwendungen eingegangen. Ø. M. Andersen und M. Jordheim referieren in Kapitel 10 über Anthocyane, und in Kapitel 11 stellen D. Ferreira, D. Slade und J. P. J. Marais neuere Forschungen über Flavane und Proanthocyanidine wie Oligoflavanole vor. In zwei Beiträgen von K. M. Valant-Vetschera und E. Wollenweber sowie von C. A. Williams

werden die Strukturdaten und Eigenschaften von Flavonen, Flavonolen und ihren O-Glycosiden mithilfe umfangreicher Tabellen präsentiert. Flavonoide, die in der Natur als C-Glycoside vorkommen, werden von M. Jay, M. R. Viricel und J.-F. Gonnet besprochen. In Kapitel 15 beschäftigen sich R. J. Grayer und N. C. Veitch mit Strukturen und natürlichen Quellen von Flavononen und Dihydroflavonolen. Auch hier findet man umfangreiche Tabellen mit Strukturdaten. Dieselben Autoren informieren in Kapitel 16 auch über Chalkone und Aurone. Das letzte Kapitel von D. Ferreira, D. Slade und J. P. J. Marais ist ein aktueller Bericht über Oligoflavonoidstrukturen, die sich von den Flavanol-abgeleiteten Proanthocyanidinen unterscheiden. Vor allem sind

die Arbeiten über die Tetra-, Penta- und Hexaflavonoide interessant, die in der Zeit nach dem letzten umfassenden Übersichtsartikel von H. Geiger veröffentlicht wurden.

Einen guten Schlusspunkt setzt Ø. M. Andersen mit einem Anhang, der nicht weniger als 1609 Strukturen von Isoflavonoiden auflistet, die im Zeitraum von 1991 bis 2004 analysiert wurden. Seine einführenden Anmerkungen hierzu erscheinen in der vorliegenden Ausgabe allerdings an der falschen Stelle abgedruckt – ein angesichts der ansonsten hohen Qualität dieses hervorragenden Werks verzeihlicher Fehler. Das einzige, was zu bemängeln wäre, ist die Tatsache, dass chemische Synthesen von Flavonoiden in recht

geringem Umfang berücksichtigt wurden.

Diese ausgezeichnete Monographie bietet eine wertvolle Zusammenfassung der aktuellen Chemie und Biochemie der Flavonoide. Als Nachschlagewerk kann es allen, die auf diesen Gebieten forschen und lehren, außerordentlich nützlich sein. Jeder Wissenschaftler, der sich mit Polyphenolen beschäftigt, sollte auf dieses umfassende Werk unbedingt zugreifen können.

Stéphane Quideau
Laboratoire de Chimie Organique et
Organométallique
Université Bordeaux 1
Pessac (Frankreich)

DOI: 10.1002/ange.200685399