



## Determination of Complex Reaction Mechanisms



Analysis of Chemical, Biological, and Genetic Networks. Von John Ross, Igor Schreiber und Marcel O. Vlad. Oxford University Press, Oxford 2005. 226 S., geb., 94,50 \$.—ISBN 0-19-517868-8

Über die letzten Jahrzehnte sind bemerkenswerte Fortschritte in der molekularen und supramolekularen Chemie, den Materialwissenschaften und der Biologie errungen worden. Begleitet wurden diese Neuerungen stets von wichtigen Entwicklungen in der chemischen Reaktionskinetik, von denen einige im vorliegenden Buch von J. Ross, I. Schreiber und M. O. Vlad beschrieben werden. Zu bemerken ist, dass John Ross seit Jahrzehnten als einer der führenden Wissenschaftler auf diesem Gebiet gilt und, zusammen mit S. Berry und S. Rice, bereits Autor eines weit verbreiteten Lehrbuchs der physikalischen Chemie ist.

Der Inhalt dieses Buchs wird auf einem relativ fortgeschrittenen Niveau präsentiert, sodass beim Leser Grundkenntnisse der Reaktionskinetik vorausgesetzt werden. Dabei ist die Art, wie sich das Buch seinem Thema nähert, unkonventionell und in dieser Form neu. Zentrales Thema ist die Aufklärung der Mechanismen komplexer chemischer, biochemischer und genetischer Reaktionsnetzwerke. Erstaunlicherweise unterscheidet sich der heutzutage typische Lösungsansatz nur wenig von der

Vorgehensweise vergangener Jahrzehnte: Zerlegung des Gesamtmechanismus in Einzelschritte und deren Analyse, dann Rekonstruktion der Gesamtreaktion als Sequenz der untersuchten Reaktionschritte. Der in diesem Buch präsentierte Ansatz ist dagegen anders und stützt sich auf das immense Spektrum moderner, leistungsfähiger Analysetechniken, die z.B. die gleichzeitige Detektion hunderter Substanzen ermöglichen und enorme Datenmengen über das gesamte Reaktionsgeschehen liefern. Der große Wert des Buches liegt in der ausführlichen Beschreibung experimenteller und theoretischer Vorgehensweisen zur systematischen Aufklärung von Reaktionsmechanismen unter Verwendung dieser modernen Techniken. Das Buch kann als eine Gebrauchsanweisung gelesen werden, die die Methoden zur Ableitung von Reaktionsmechanismen aus kinetischen Messdaten beschreibt.

Das Buch gliedert sich in dreizehn Kapitel, wobei neben den im Titel genannten Autoren auch Beiträge von A. Arkin, P. J. Oefner und N. Zamboni zu finden sind. Nach einer knappen Einführung in grundlegende Begriffe und Definitionen werden in Kapitel 3 einige der analytischen Techniken besprochen, die für das „Data-Mining“ und die dem Buch zugrundeliegenden Auswertungsmethoden genutzt werden. Diese Techniken umfassen ein weites Spektrum, einschließlich Massenspektrometrie, Kapillarelektrophorese, DNA-Mikroarrays und Genomanalyse.

Im Hauptteil werden spezielle Methoden der Datenauswertung behandelt. Zum Beispiel wird in Kapitel 5 das Antwortverhalten komplexer Systeme auf Pulsstörungen diskutiert und speziell die theoretische Ableitung von chemischen Kausalverbindungen besprochen. Eine Abhandlung zur Analyse unverzweigter Kettenreaktionen leitet über zu Kapitel 6, in dem anhand eines praktischen Beispiels (Teilprozess der Glycolyse) das experimentelle Vorgehen diskutiert wird. Dieses Beispiel wird auch im Folgenden für die Diskussion der äußerst interessanten Aufklärung von Reaktionsmechanismen durch die CMC-Methode („correlation metric construction“) herangezogen. Das wesentliche Ziel dieser automatischen Datenauswertung ist es, Reaktions-

schemata abzuleiten, separable Teilsysteme zu identifizieren und darauf aufbauend komplexe Mechanismen darzustellen. Andere Techniken, die in diesem Zusammenhang diskutiert werden, sind Methoden wie „entropy metric construction“, „entropy reduction“ und genetische Algorithmen.

Der entscheidende Aspekt dieser Analysetechniken besteht darin, dass sie eine Lösung für ein grundlegendes Problem der Reaktionskinetik bieten können: wie man einen Reaktionsmechanismus erstellt, ohne auf Vermutungen oder „Intuition“ zurückgreifen zu müssen. Es werden verblüffende Auswertungsmethoden beschrieben, die auf viele komplexe Systeme in der modernen Chemie und Biologie anwendbar sein sollten, wenngleich man einräumen muss, dass sie bislang nur an wenigen Beispielen erprobt wurden. Die Stoffauswahl orientiert sich in erster Linie an den bemerkenswerten Ergebnissen, die die Autoren in den letzten 15 Jahren erzielt haben. Dabei ist es den Autoren gelungen, ein kompliziertes und unkonventionelles Thema in einer kohärenten und nützlichen Weise zu präsentieren. Etwas ungewiss ist, wie schnell sich dieser neuartige Ansatz in der Praxis durchsetzen wird. Verknüpft damit ist die Frage, welche Leserschaft dieses Buch erreichen will. Um die Techniken voll ausschöpfen zu können, ist ein fundiertes Grundwissen in Statistik, linearer Algebra und Differentialrechnung nötig, und auch Programmierkenntnisse wären von Vorteil. Darüber hinaus ist es auch Studenten der physikalischen und biophysikalischen Chemie zu empfehlen, sowie Wissenschaftlern, die sich mit der Aufklärung von Reaktionsmechanismen in komplexen chemischen, biochemischen, pharmakologischen oder genetischen Systemen beschäftigen.

Oliver Steinbock  
Department of Chemistry and  
Biochemistry  
Florida State University  
Tallahassee (USA)

DOI: 10.1002/ange.200585406