

tionsgehalt und Verwendung recht neuer Literatur aus, wobei zu erwarten ist, daß durch Literaturnachträge in späteren Bänden die Informationen weiter aktualisiert werden.

Die Substanzen wurden leider uneinheitlich bezeichnet; häufig wurden die internationalen Kurznamen verwendet, jedoch meistens in der lateinischen Fassung (z. B. Calcii benzamidosalicylas, Acidum flufenamicum). Hierdurch entsteht unnötige Verwirrung. Auswahlkriterien sind nicht erkennbar. Einerseits werden Substanzen beschrieben, die noch nicht oder nicht mehr als Arzneimittel verwendet werden, andererseits fehlen sehr gebräuchliche Pharmaka (z. B. Reserpin).

Alle Monographien sind nach einheitlichen Gesichtspunkten abgefaßt. In sehr komprimierter und zugleich übersichtlicher Art werden Biotransformationsschemata, die Ausscheidungswege und der Nachweis der Metaboliten bei den verschiedenen Spezies zusammen mit der hierfür verwendeten Analytik dargestellt. Im anschließenden Teil „Bemerkungen“ werden u. a. die z. T. lückenhaften oder gar widersprüchlichen Angaben in der Literatur diskutiert. Außerdem werden ergänzende Daten zu den einzelnen Metaboliten, z. B. Verteilung im Organismus und Wirksamkeit gegeben, und – wobei kein Anspruch auf Vollständigkeit erhoben wird – weitere Angaben wie zur Pharmakokinetik und „Drug Interaction“ gemacht. Eine systematische Darstellung wurde bei diesem recht komplexen Teil offenbar nicht angestrebt.

Die Monographiensammlung kann allen, die sich mit der Biotransformation von Arzneimitteln befassen, zur Übersichtsinformation empfohlen werden.

K.-O. Vollmer [NB 433]

Molecular Structure and Dimensions. Guide to the Literature 1935–1976. Organic and Organometallic Crystal Structures. Herausgegeben von O. Kennard, F. H. Allen und D. G. Watson für das Cambridge Crystallographic Data Centre und die International Union of Crystallography. Bohn, Scheltema & Holtema, Utrecht 1977. 683 S., geb. Hfl. 150.00.

Zwar besteht auch dieser Band wie der „60-Year Structure Index“ der „Structure Reports“ aus Registern (Substanznamen-, Formel-, Autoren- und Literaturregister), doch sind alle Register mit Computerprogrammen aus der Datenbank organischer und metallorganischer Kristallstrukturen des Cambridge Crystallographic Data Centre entwickelt und vom Magnetband mit Fotosatz gedruckt. Dies ist eine Voraussetzung für größere Aktualität, Vielseitigkeit und Zuverlässigkeit.

Substanznamen können viele Strukturelemente einer chemischen Verbindung erfassen. Das nach dem KWIC-Konzept (Keyword-in-context) aufgebaute Register führt jede Verbindung unter jedem relevanten Wortteil auf und ermöglicht damit nicht nur den Zugriff zu definierten Substanzen, deren exakte Nomenklatur schwierig ist, sondern vor allem auch zu verwandten Substanzen und Substanzgruppen. Im Teil A sind 10156 organische Verbindungen und solche metallhaltigen zusammengestellt, die einen interessanten organischen Teil enthalten. So findet man z. B. 49 Adenin-Derivate, 77 Porphin-Derivate und -Komplexe sowie 50 deuterierte Verbindungen. Im Teil B sind 5777 Organometallverbindungen und Komplexe zweistufig geordnet aufgelistet. Man findet für jedes Metall alle Verbindungen noch einmal nach relevanten Wortteilen sortiert, z. B. 139 Phosphan-Komplexe des Platins oder 8 Carben-Komplexe des Chroms.

Das Summenformelregister listet im Teil A alle Verbindungen in der üblichen Weise auf (C, H, alle andern Elemente in alphabethischer Reihenfolge), im Teil B werden die Formeln noch einmal permutiert geordnet, so daß z. B. alle Fluor- oder alle Silicium-Verbindungen zusammen stehen. In beiden Fällen werden dabei nicht immer echte Summenformeln verwendet, sondern – wenn sinnvoll – Teilsummenformeln der

„residues“, der diskreten Baugruppen der Verbindung. Alle Register führen u. a. direkt auf das Originalzitat.

Das gedruckte Buch kann nicht die Vielseitigkeit des Zugriffs bieten, die in einer Datenbank gegeben ist, weil Umfang und Kosten zu Kompromissen zwingen. Den Kompromissen fielen Stichworte wie „hydrates“ oder „inclusion compounds“ zum Opfer, aber auch die Möglichkeit, alle Komplexe von Liganden wie Salicyldehyd oder Thiocyanat an einer Stelle zu finden.

Die Zuverlässigkeit der Register ist durch die programmierte Erstellung und den automatischen Druck garantiert, wenn das zugrundeliegende Material einwandfrei ist. Um dies zu erreichen, durchläuft das Material bei der Aufnahme in die Datenbank zahlreiche Prüfprogramme. Die Logik unserer Sprache und Orthographie ist allerdings so kompliziert, daß uneinheitliche Nomenklatur und Schreibweise z. Z. intellektuell erkannt und korrigiert werden müssen, weil die Uneinheitlichkeit im Verein mit der strengen Logik der Sortierprogramme zu oft primitiven Fehlern bei der Einordnung ins Register führt. So stolpert der nicht mit der Arbeitsweise des Computers vertraute Benutzer z. B. über die getrennte Stellung von „Vitamin B12“ und „Vitamin B(12)“; bedeutsamer ist, daß Verbindungen des gleichen Typs nach verschiedenen Prinzipien benannt werden, z. B. „Dichloro pthalocyanato-tin(iv)“ und „Stannic pthalocyanine“.

Solche Mängel, die, am Wert des Gesamtunternehmens gemessen, geringfügig sind, haben auch traditionell erstellte Register. Die Datenbank bietet aber die Möglichkeit, relativ leicht kumulierende Register zu erstellen und dabei durch weitere Programmwicklungen die Fehler nach und nach auszumerzen.

Programmtechnisch bequem erreichbare statistische Daten zeigen mit den zahlreichen Mehrfachbestimmungen der gleichen Struktur, den notwendig gewordenen Datenkorrekturen, der Zitatverteilung in der Originalliteratur (die die Vollständigkeit der Aufnahmen zu prüfen gestattet) und dem für 1980 auf 28000 Strukturen geschätzten Bestand, wie wichtig gemeinsame internationale Anstrengungen bei der Sammlung und Erschließung wissenschaftlicher Daten geworden sind. Die mit diesem Projekt eingeleitete Entwicklung wird hoffentlich nicht nur auf Kristallstrukturen beschränkt bleiben.

Günter Bergerhoff [NB 440b]

Microbiological Aspects of Pollution Control. Von R. K. Dart und R. J. Stretton. Elsevier Scientific Publishing Company, Amsterdam–Oxford–New York 1977. 1. Aufl., VI, 215 S., geb. Dfl. 85.—.

In einem Thesenpapier des Fonds der Chemischen Industrie vom 27. Oktober 1977 steht: „Dieser durch Umweltschutz bedingte zusätzliche Aufwand kann zum ‚Nadelöhr‘ für die Produktivität der Forschung werden“. Daraus ergibt sich, daß heute jeder Chemiker Kenntnisse im Zusammenhang mit den mikrobiellen Aspekten des Umweltschutzes haben sollte. Das vorliegende Buch wendet sich an Ingenieure und beschreibt deshalb ausführlich auch Methoden z. B. zur mikrobiellen Wasserkontrolle, die dem Mikrobiologen und Hygieniker seit langem vertraut sind. In elf Kapiteln werden behandelt: die mikrobielle Bildung von umweltschädlichen Verbindungen, Luftverschmutzung und Mikroorganismen, Gesundheitsgefahren durch pathogene Mikroorganismen aus dem Wasser, Wasseruntersuchung, Abwasserbehandlung, Desinfektion und Wasserkreislauf, Eutrophierung, Verunreinigung durch Wärme, der Schwefelkreislauf und Abfallwiedergewinnung, Verschmutzung durch Öl und der biologische Abbau, Bildung organischer Quecksilber- und Arsenverbindungen, Ursachen des Vorkommens von Nitrat, Nitrit und Hydroxylamin in Wasser sowie Bildung der cancerogenen Nitrosamine und des Aflatoxins.