

Die Existenz einer solchen Beziehung Gl. (d) ist um so bemerkenswerter, als die Reaktivitäten innerhalb der Begegnungskomplexe $\{[\text{Ox}1], y_1\}$, $\{[\text{Ox}1], y_2\}$, $\{[\text{Ox}1], y_3\}$... usw. nicht eine einfache Funktion der Reduktionspotentiale der Reduktionsmittel y_1 , y_2 , y_3 ... sind. So ist z. B. die „outer-sphere“-Reduktion von $[\text{Ox}1]$ und $[\text{Ox}2]$ mit $[\text{Ru}(\text{NH}_3)_6]^{2+}$ um etwa drei Zehnerpotenzen schneller als die entsprechende mit dem stärkeren Reduktionsmittel $[\text{Cr}(\text{OH}_2)_6]^{2+}$. Also ist für „outer-sphere“-ET-Reaktionen zwischen Übergangsmetallkomplexen das Reaktivität-Selektivität-Prinzip^[8] hier nicht erfüllt.

Eingegangen am 1. Februar 1980 [Z 505]

- [1] G. M. Brown, N. Sutin, J. Am. Chem. Soc. 101, 883 (1979).
- [2] M. Faraggi, A. Feder, Inorg. Chem. 12, 236 (1973).
- [3] R. J. Christensen, J. H. Espenson, A. B. Butcher, Inorg. Chem. 12, 564 (1973).
- [4] J. H. Espenson, R. T. Wang, J. Am. Chem. Soc. 93, 380 (1971); A. Adege, J. F. Iyun, J. F. Ojo, J. Chem. Soc. Dalton Trans. 1977, 115.
- [5] J. Doyle, A. G. Sykes, J. Chem. Soc. A 1968, 2836.
- [6] a) A. Zwickerl, H. Taube, J. Am. Chem. Soc. 83, 793 (1961); b) P. Dodel, H. Taube, Z. Phys. Chem. (Frankfurt am Main) 44, 92 (1965); D. L. Toppin, R. G. Linck, Inorg. Chem. 10, 2635 (1971).
- [7] J. F. Endicott, H. Taube, J. Am. Chem. Soc. 86, 1686 (1964).
- [8] B. Giese, Angew. Chem. 89, 162 (1977); Angew. Chem. Int. Ed. Engl. 16, 125 (1977); A. Pross, Adv. Phys. Org. Chem. 14, 69 (1977).

NEUE BÜCHER

Chemische Struktur und biologische Aktivität von Wirkstoffen. Methoden der Quantitativen Struktur-Wirkungs-Analyse. Von J. K. Seydel und K.-J. Schaper. Verlag Chemie, Weinheim 1979. XI, 359 S., geb. DM 118.00.

Das Buch wird dem im Vorwort formulierten Anspruch gerecht, eine Einführung in Methoden und Möglichkeiten des komplexen Arbeitsgebietes der Quantitativen Struktur-Wirkungs-Analyse zu sein.

Nach mehreren in den letzten Jahren erschienenen Büchern mit ähnlicher Zielsetzung handelt es sich hierbei um das erste deutschsprachige Buch dieser Art. Es weist gegenüber seinen englischsprachigen Vorgängern zahlreiche Vorteile auf. Die Gesamtproblematik wird sehr umfassend behandelt. Die Darstellung reicht von der genauen Beschreibung experimenteller physikochemischer und biologischer Bestimmungen, der erklärenden Definition der verwendeten Parameter mit einer Sammlung von Konstanten für mehr als 700 Substituenten im Anhang, der historischen Entwicklung der fundamentalen Theorien, der Ableitung der wichtigsten halbquantitativen Verfahren (Topliss-Schema, Simplex-Methode nach Darvas, Fibonacci-Verfahren nach Bustard), der durch zahlreiche Abbildungen und Beispiele besonders verständlichen Erläuterung der gebräuchlichsten Methoden mit Angabe der theoretischen Grundlagen (Hansch-Analyse, Free-Wilson-Verfahren), der kurzen Schilderung neuerer Verfahren (Cluster-, Diskriminanten-, Faktoren-Analyse, Pattern Recognition) mit wertvollen Hinweisen für die Beschaffung entsprechender Rechenprogramme bis hin zu zahlreichen publizierten Beispielen von Struktur-Wirkungs-Beziehungen.

Die Vor- und Nachteile und die Grenzen der Einsatzmöglichkeiten der besprochenen Verfahren werden dabei – im Gegensatz zu den bei amerikanischen Autoren oft zu beobachtenden Euphorie – kritisch herausgestellt.

Das Studium der umfangreichen Übersicht über publizierte Quantitative Struktur-Wirkungs-Analysen, die mit bewundernswertem Fleiß zusammengestellt worden ist, wird durch die nach biologischen Effekten geordnete tabellarische Darstellung sehr erleichtert.

Das vorliegende Werk enthält eine der umfassendsten Literatursammlungen für dieses Arbeitsgebiet. Anders als bei den bisherigen Zusammenstellungen ist auch die europäische Literatur gebührend berücksichtigt worden.

Folgende kritische Bemerkungen seien gestattet: Bei dem in der Fachliteratur sowieso schon vorhandenen Abkür-

zungswirrwarr ist die Einführung neuer Kürzel (z. B. QSWB = Quantitative Struktur-Wirkung-Beziehung, für QSAR = Quantitative Structure Activity Relationship) zu bedauern. – Die Ausgewogenheit zwischen den Kapiteln scheint nicht immer gewahrt, die Relevanz der besprochenen Vorgehensweisen für den synthetisierenden Arzneimittelchemiker nicht immer richtig beurteilt zu sein. Dies mag darauf beruhen, daß das Buch zugleich die Arbeiten des Instituts für Experimentelle Biologie und Medizin in Borstel, in dem beide Autoren tätig sind, auf diesem Gebiet zusammenfaßt.

Um den Gebrauch des Buches am Arbeitsplatz und die Verwendung als wertvolles Nachschlagewerk zu fördern, sollte das bisher nur siebenseitige Sachregister einheitlich gestaltet (z. B. sind nicht alle Abkürzungen aufgeführt) und wesentlich erweitert werden (z. B. interessieren den Chemiker die untersuchten Stoffklassen; bisher sind nur Benzylpyridinium-Ionen, Carbonsäurehydrazide, Phenylguanine, Sulfonamide und Sulfonylharnstoffe erwähnt).

Das Buch kann allen denjenigen als anspruchsvolle Lektüre und/oder interessantes Nachschlagewerk empfohlen werden, die auf dem komplexen interdisziplinären Arbeitsgebiet der Wirkstoffforschung – sei es Arzneimittel- oder Pflanzenschutzmittelforschung – tätig sind.

Eike Möller [NB 511]

Radiotracers in Agricultural Chemistry. Von M. F. L'Annunziata. Academic Press, New York 1979. XX, 536 S., geb. \$ 62.00.

Der besondere Wert des Buches liegt in seiner Art, als Lehr- und Arbeitsbuch Studenten wie Praktikern zunächst eine Einführung in das weit gefaßte Arbeitsgebiet zu geben, von Kernstrahlung und Isotopenzerfall bis hin zur Scintillatorteknik. Nur gut ein Drittel des Inhalts befaßt sich mit Problemen der Agrikulturchemie und ihrer Lösung durch Anwendung radioaktiver Isotope; zwei Drittel der angeführten Verfahren und Daten könnten auch in einem Laboratoriumsbuch für radioaktives Arbeiten stehen. Insofern ist der Titel leider etwas irreführend.

Hervorzuheben ist die Aktualität der jedem Abschnitt reichlich beigegebenen Literaturzitate. Wenn also trotz der übersichtlichen Darstellung beim Leser noch Fragen offen bleiben, sind Wege zu intensivem Studium aufgezeigt.

Im Abschnitt über spezielle agrikulturchemische Probleme und Techniken liegt der Schwerpunkt auf der Isolierung und Lokalisierung eines radioaktiv markierten Elementes oder dessen Verbindungen. Der Hauptteil, die Studien an Böden, Pflanzen und Tieren, ist etwas weniger umfangreich, allerdings ergänzt durch rund 250 Literaturzitate, größtenteils aus