

in der in-vivo-NMR-Spektroskopie und der spektroskopischen Bildgebung. Ein Kapitel ist Sicherheitsaspekten gewidmet.

Da insbesondere die in-vivo-NMR-Spektroskopie sich zur Zeit besonders schnell entwickelt, sind hier einige Einschätzungen und Erwartungen bereits überholt. So ergibt eine durch die frühe Fertigstellung des Buches bedingte Beschränkung der Spektroskopie auf Untersuchungen zum Energiestoffwechsel mit der  $^{31}\text{P}$ -NMR-Spektroskopie bereits heute ein verzerrtes Bild. Wichtige Fortschritte der bildkontrollierten lokalisierten  $^1\text{H}$ -NMR-Spektroskopie mit wissenschaftlichen und medizinischen Anwendungen zum Hirnstoffwechsel von Aminosäuren und Neurotransmittern am Menschen sind erst im vergangenen Jahr verzeichnet worden.

Klinische Anwendungen werden im Bereich des zentralen Nervensystems, des kardiovaskulären Systems, des Abdomens und Beckens und der Skelettmuskulatur diskutiert. Einige Beispiele stützen sich dabei jedoch auf älteres Bildmaterial. Die Hauptanwendungen am Gehirn und der Wirbelsäule werden eher zu knapp dargestellt und bei den Herzuntersuchungen sind die durch schnelle EKG-synchronisierte NMR-Filme erheblich erweiterten Möglichkeiten unberücksichtigt geblieben. Dennoch vermitteln die klinischen Kapitel dem Nicht-Mediziner wichtige Eindrücke von der medizinischen Bedeutung der Methode, während für rein klinisch interessierte Anwender auch andere, umfangreichere Bilddatensammlungen zur Verfügung stehen.

Insgesamt folgt das Buch erfreulicherweise dem „mainstream“ der Entwicklungen und Anwendungen. Dies ist sicher mit der engen Verbundenheit der Herausgeber und Autoren mit der Industrie und der klinischen Praxis zu erklären. In diesem sich ständig verändernden Forschungsgebiet ist der Bezug zur Realität der in-vivo-NMR-Spektroskopie, gegeben durch die Anwendung am Menschen, eine wesentliche Voraussetzung für eine erfolgreiche und intelligente Umsetzung „klassischer“ NMR-Techniken. Die einzelnen Texte sind für eine Einführung ausführlich, aber nicht langatmig, und mit Kompetenz geschrieben. Das Buch ist sehr übersichtlich strukturiert und vor allem in den methodischen Abschnitten didaktisch ausgezeichnet aufbereitet. Umfangreiche Literaturangaben am Ende jedes Kapitels erleichtern den Einstieg in die Originalliteratur. Ich halte dieses Buch im Gegensatz zu einigen anderen „schnell geschriebenen“ Werken zur NMR-Tomographie für eine wirkliche Bereicherung. Es ist für Chemiker, Physiker, Biologen und Mediziner geeignet, die sich in dieses Gebiet einarbeiten wollen, ihr Verständnis vertiefen möchten, oder einfach nur ein weiterverweisendes Nachschlagewerk für die tägliche Arbeit wünschen.

Jens Frahm [NB 942]

Max-Planck-Institut für  
biophysikalische Chemie, Göttingen

**Math/Chem/Comp 1987.** Herausgegeben von R. C. Lacher.  
Elsevier Science Publishers. Amsterdam (NL) 1988. 378  
S., geb. \$ 144.75. – ISBN 0-444-42930-1

Dieses Buch mit dem etwas abstoßenden Titel „Math/Chem/Comp 1987“ sind die „Proceedings“ einer Konferenz über die Berührungsflächen zwischen Mathematik, Chemie und der Computerwissenschaft, die im Juni 1987 in Dubrovnik stattfand. Zwei Institutionen, die Florida State University und das Ruđer-Bošković-Institut in Zagreb, wirken bei der Organisation dieser Konferenzen zu-

sammen; gemäß Vorwort soll das Treffen interdisziplinäre und longitudinale (?) Studien fördern. Das Buch enthält insgesamt 24 Beiträge, die sich grob in folgende Themenkreise gliedern lassen: 1) Supercomputer und Chemie, 2) Knotentheorie, 3) Graphentheorie und 4) Polymere. Der Schwerpunkt liegt nicht, wie man aufgrund der Abkürzung „Comp“ vermuten könnte, bei der numerischen Quantenchemie, sondern bei topologischen Methoden zur Charakterisierung ganz unterschiedlicher chemischer Strukturen.

Die ersten beiden Artikel (D. Edelson, D. Edelson et al.) über Supercomputer (Vektorrechner) versuchen, die heutige Situation und mögliche Entwicklungen für die Zukunft bei der numerischen Behandlung naturwissenschaftlicher Probleme darzustellen. Diesem Thema wurde im letzten Jahr in anderen Publikationen schon sehr viel Raum gewidmet; der zweite Artikel berichtet speziell über das Projekt eines Expertensystems für Chemie an der Florida State University.

Interessanter ist der zweite Teil: Er enthält eine lesenswerte Einführung in die Knotentheorie (J. Simon), ein Teilgebiet der Topologie, das in der letzten Zeit bei der Charakterisierung nichtstarrer cyclischer Polymere nützliche Anwendung fand. Auch in der Mathematik ist die Knotentheorie ein paar Schritte vorangekommen; so gelingt es jetzt beispielsweise, die beiden chiralen Formen des Kleeblattknotens durch die zugehörigen topologischen Invarianten („Jones-Polynome“) zu unterscheiden. Für den an Chemie und Anwendungen interessierten Leser fehlt jedoch an dieser Stelle ein Beitrag z. B. über verknotete Stränge von cyclischen DNA-Molekülen, die gerade in letzter Zeit dank neuer experimenteller Techniken sichtbar gemacht werden konnten.

Ein wesentlicher Teil des Buches beschäftigt sich mit Anwendungen der Graphentheorie in der Chemie. Ziel der Graphentheorie ist es, Struktureigenschaften von Molekülen in (mathematisch definierte) Eigenschaften von Graphen zu übersetzen und diese dann mit physikalisch-chemischen Eigenschaften zu korrelieren (Artikel von N. Trinajstić). Besonders gut geeignet ist das Verfahren für planare Strukturen wie konjugierte Ketten, die im Artikel von M. Randić und N. Trinajstić behandelt werden. Dem Band ist zu entnehmen, daß man sich auch um eine „dreidimensionale Graphentheorie“ bemüht (M. Randić), um große Moleküle – synthetische und natürliche Polymere – zu charakterisieren. Ein Literaturzitat von 1985 weist sogar auf graphentheoretische Beiträge zur Krebsforschung hin – das scheint dem Rezensenten nun doch etwas hoch gegriffen. Zwei Artikel von R. Randell befassen sich mit sogenannten Konformationsräumen, mit denen man versucht, flexible Strukturen in der Chemie zu beschreiben. Eine typische Frage lautet hier: Ab welcher Anzahl von Atomen kann man cyclische Strukturen (mit oder ohne Vorgabe von Bindungswinkeln) verknoten?

Das letzte Hauptthema des Buches und der Konferenz, Polymere, bringt die auf diesem Gebiet heute üblichen Schlagwörter ins Spiel: wiederum Knotentheorie, „random walk“, auch in eingeschränkten Geometrien (Polymere in porösen Materialien), „lattice animals“, Skalierung und kritische Exponenten, Ising-Modelle. Eine Ausnahme ist der Übersichtsartikel von L. Mandelkern und A. J. Peacock, der die Beziehung zwischen Struktur und mechanischen Eigenschaften von kristallinen Polymeren rein phänomenologisch behandelt. Eine analytische topologische Invariante für verschlungene Polymersysteme, die Windungszahl, wird von M. G. Brereton beschrieben. Die als Pfadintegral definierte Windungszahl unterscheidet zwar topologisch verschiedene Situationen nicht so gut wie die Polynome der Knotentheorie, ihre Änderung oder Erhal-

tung ist jedoch bei dynamischen Prozessen ein wichtiger Indikator für die Art des Reaktionsmechanismus. Polymere und verzweigte Polymere als „random walks“ oder „lattice animals“ zu behandeln, ist schon seit einigen Jahren üblich. Verbindungen zur Beschreibung ungeordneter Strukturen durch Fraktale sind möglich, ebenso zur Theorie der Renormierung, die ausdrücklich im Artikel von D. S. Gaunt erwähnt wird. Insgesamt gesehen ist der Teil über Polymere der interessanteste des Buches, weil dort viele physikalisch relevante Konzepte vorgestellt werden und die Artikel in ein großes Gebiet derzeitiger Forschung führen.

Ein Register ist nicht nur bei Lehrbüchern hilfreich, es wäre es auch bei diesem Konferenzbericht. Der Preis des Buches ist für den Privatmann kaum erschwinglich und für unsere mit kärglichen Etats ausgestatteten Bibliotheken wohl auch.

Werner Gans [NB 948]  
Institut für Physikalische Chemie  
der Freien Universität Berlin

**Arzneimittel – Fortschritte 1972 bis 1985.** Herausgegeben von A. Kleemann, E. Lindner und J. Engel. VCH Verlagsgesellschaft, Weinheim 1987. XIV, 1517 S., geb., DM 540.00. – ISBN 3-527-26329-2

Das vorliegende Buch ist ein Fortschritts- und Ergänzungsband zum fünfbändigen Werk von Ehrhart und Ruschig: Arzneimittel – Entwicklung, Wirkung und Darstellung, das 1972 in der 2. Auflage erschien.

In 20 Kapiteln werden von vielen Experten die Fortschritte der 13 Jahre zwischen 1972 und 1985 abgehandelt.

Der Band beginnt mit einer kurzen Zusammenfassung von J. K. Seydel über die Wirkstoffentwicklung = Drug Design, die auf 51 Seiten die Theorie von den Struktur-Wirkungs-Analysen bis zu Molecular Modelling und Computer Graphics erläutert.

Im zweiten Kapitel (59 Seiten) über Enzym-Inhibitoren berichtet H. Tschesche über reversible Proteinase-Inhibitoren einschließlich der Renin- und Angiotensin-Converting-Enzym-Inhibitoren sowie über mikrobielle  $\alpha$ -Glucosidase-Inhibitoren, aber es fehlt jeder Hinweis auf irreversible Enzym-Inhibitoren und damit auf Substanzen wie  $\alpha$ -Difluormethylornithin (vgl. z.B. C. Walsh, *Tetrahedron* 38, (1982) 871-909). Einige dieser Enzym-Inhibitoren nebst Mechanismen werden aber später bei den Antihormonen im 18. Kapitel diskutiert.

Im dritten kurzen Kapitel (36 S.) fassen T. Y. Shen und P. Davies die neuesten Entwicklungen auf dem Gebiet der Entzündungshemmer und ihrer wichtigsten Synthesen zusammen.

Im vierten kurzen Kapitel (28 S.) gibt J. A. Vida einen Bericht über Fortschritte auf dem Gebiete der psychotropen Arzneimittel von den Neuroleptika bis zu den Anxiolytika.

Anschließend behandeln im fünften Kapitel (281 S.) jeweils mehrere Autorenguppen die neuen Herz-Kreislauf-Therapeutika. Nach einem kurzen Abschnitt über Sympathomimetika und positiv inotrope Substanzen werden recht ausführlich die Herzglycoside besprochen. Anschließend werden Antihypertensiva diskutiert, wobei neben den reinen  $\alpha_1$ -Adrenorezeptor-Antagonisten wie Prazosin auch Ketanserin aufgeführt wird. Nach den zentral wirkenden  $\alpha_2$ -Adrenorezeptor-Agonisten vom Clonidin-Typ werden die neuen Dopamin-Agonisten wie Fenoldopam kurz er-

läutert und dann Pharmaka mit direkter myogener gefäßdilatierender Wirkung wie Hydralazin oder Minoxidil behandelt. Unter diesen Substanzen befindet sich auch der neue, hochinteressante Kalium-Kanal-Agonist BRL-34915, dessen Wirkungsweise aber erst später aufgeklärt wurde.

Die darauf folgenden Tabellen über Substanzen mit Wirkung auf das Renin-Angiotensin-System zeigen, wieviele ähnliche und hochwirksame ACE-Inhibitoren zur Zeit entwickelt werden; darüber hinaus lassen sie den Beginn der sehr aktiven Phase auf dem Gebiet der Renin-Inhibitoren und Angiotensin-II-Antagonisten erkennen. Es folgt die kurze Beschreibung der chemischen Synthese der meisten hier aufgeführten Herz-Kreislauf-Therapeutika. Der folgende Abschnitt gibt einen Überblick über die Entwicklung der Beta-Rezeptoren-Blocker mit Tabellen, in denen jeweils die wichtige sympathomimetische Eigenaktivität (ISA) angegeben ist. Bei den antiangiösen und antischämischen Mitteln (23 S.) werden leider die so sehr wichtigen Calcium-Antagonisten nebst Synthesen nur sehr kurz behandelt. Die folgenden Abschnitte fassen die Vasotherapeutika und Nootropika zusammen.

Im sechsten Kapitel (21 S.) berichten D. Bormann und R. Muschaweck kurz über die Entwicklung von Diuretika, ohne jedoch neben den Standard-Sulfonamid-Diuretika die Aldosteron-Antagonisten vom Spironolacton-Spirorenon-Typ zu erwähnen, die aber im 9. Kapitel über Steroidhormone diskutiert werden.

Im siebten Kapitel (28 S.) werden von A. Novakova-Banet, H. Feiler, J. Müller und H. Zilg Blutfaktoren und Gerinnung sowie Fibrinolytika vor den noch nicht abgehandelten Plasminogenaktivatoren sowie schließlich Blutersatzstoffe erläutert.

Im achten Kapitel (42 S.) von E. Granzer über Lipidsenker wird kurz auf Compactin und Mevinolin sowie ihre sinnvolle Kombination mit Gallensäure-bindenden Polymeren wie Cholestipol hingewiesen.

Der folgende erste Abschnitt im 9. Kapitel von W. König über regulatorische Peptide ist mit über 200 Seiten eine kleine Monographie, die vom Somatostatin über ANF (atrial natriuretic factor) die Enkephaline und Insulin bis zu den Interleukinen und Tumor-Nekrose-Faktoren (TNF) reicht und bei den wichtigen Peptiden immer auch Struktur-Wirkungs-Beziehungen diskutiert. In der präzisen Übersicht von U. Stache im Kapitel 9.2. (41 S.) über die Fortschritte auf dem Gebiet der Steroidhormone fehlen eigentlich nur Hinweise auf die sich schon damals abzeichnende Entwicklung der Aromatase-Hemmer für die zukünftige Behandlung von Mamma- und Prostatacarcinomen, die aber kurz im 18. Kapitel behandelt werden.

Bei den oralen Diabetika (Kapitel 10, 18 S.) diskutieren V. Hitzel und R. Weyer neben den Stimulatoren der endogenen Insulinsynthese kurz auch neue Substanzen wie Acarbose und Sorbinil, die den Blutglucosespiegel senken.

Im elften Kapitel (87 S.) gibt G. Beck einen Überblick über die Entwicklung bei den Prostaglandinen, Thromboxanen und Leukotrienen und bespricht die zukünftigen sowie potentiellen Anwendungen auf dem Gebiete der Fertilität, der Therapie von Magenulcera sowie insbesondere der Herz-Kreislauf-Erkrankungen und faßt die neuen Thromboxan-Synthetase-Hemmer und -Antagonisten sowie die 5-Lipoxygenase-Hemmer und Leukotrien-Antagonisten in kurzen Tabellen zusammen.

Im zwölften Kapitel (33 S.) beschreiben U. Achterath-Tuckermann, G. Dreßen, M. Mollière und J. Engel die Fortschritte bei den Atemwegs-Therapeutika. Neben den Antitussiva und  $\beta_2$ -Stimulatoren werden die Antiasthmika-Antiallergika kurz behandelt, wobei überraschender-