

**Computational Chemistry. An Emphasis on Practical Calculations** (Reihe: Studies in Physical and Theoretical Chemistry, Vol. 56). Von *M. D. Johnston*. Elsevier, Amsterdam 1988. XVIII, 680 S., geb. Hfl 245.00, Paperback Dfl 245.00. – ISBN 0-444-42962-X/0-444-42963-8

Offenbar ist dies Buch ein ausgearbeitetes Skriptum zu einem Einführungs-Kurs in die Datenverarbeitung für Chemiestudenten. Der Inhalt umfaßt in didaktisch geschickter Reihenfolge: 1) grundlegende Aspekte und Begriffe der elektronischen Datenverarbeitung mit Schweregewicht auf Personal-Computern (Algorithmen, strukturiertes Programmieren, Benutzerfreundlichkeit, Sortierverfahren, Textverarbeitung, Tabellenbearbeitung, Datenbanken, Rechner und Netzwerke, sinnvolle PC-Grundausstattung, Programmiersprachen); 2) eine Reihe von anwendungsbezogenen Rezepten aus dem Bereich der analytischen und numerischen Mathematik (Zerlegung von rationalen Ausdrücken; Horner-Schema; nützliche Formeln für das Differenzieren und für Winkelfunktionen; komplexe Zahlen; Matrizen, Determinanten, Vektoren, lineare Gleichungssysteme); 3) die Programmierung numerischer und graphischer Probleme aus der Chemie in BASIC (2D- und 3D-Funktionsgraphen, Konturplots, einfache Molekülgraphik, einige spezielle Funktionen, Nullstellensuche, numerisches Differenzieren und Integrieren, Monte-Carlo-Integration, Matrix-Routinen, Diagonalisieren, Differentialgleichungen, Kurvenanpassung, Regression, Minimierung); sowie 4) eine größere Anzahl kleinerer und umfangreicherer, für den Chemiker nützlicher Programme (bis zu 2000 Zeilen Länge, unter anderem ein Molekül-Zeichen-Programm, ein Plot-Paket, ein Matrix-Paket, Simplex-Minimierung, schnelle Fourier-Transformation, Titrations-Kurven, NMR-Spektren-Simulation). Jeder Abschnitt wird mit Verständnisfragen und einigen Übungen abgeschlossen.

Der Text ist recht flüssig, um nicht zu sagen locker formuliert, so wie man eben in einer Vorlesung redet, um das Interesse der Studenten wach zu halten. Dies ist am Anfang des Buches auch nötig, wo zum Teil recht langatmig allgemeine Gesichtspunkte in wenig gehaltvollen Sätzen dargelegt werden („textbooks are an invaluable source of basic information“; „select the best method for the problem at hand“; „write expressions so that it is best for the actual calculation“).

Die pädagogische Strategie besteht im Vorführen und Lernen durch Nachvollziehen und Selber-Machen. Der theoretische Hintergrund der vorgeführten Methoden oder der angegebenen Programme wird (teilweise unzureichend) im Nachhinein angedeutet. Dieser sehr pragmatische Ansatz sollte Theorie-abgeneigten Chemikern gefallen, ist aber nicht nach jedermanns Geschmack.

Der Autor betont, daß die effiziente Anwendung des Hilfsmittels „Computer“ und fertiger Programme etwas eigene Programmiererfahrung voraussetzt („If you can program, the computer is your servant; otherwise, you are the computer's slave“ ist aber etwas extrem formuliert). Programmiererfahrung gewinnt man sicher am besten im Durcharbeiten der guten exemplarischen Programm-Stücke. Das Abtippen vieler Seiten Code erscheint jedoch wenig sinnvoll. Hätte man dem Buch nicht eine Diskette beilegen können? Viele Formulierungen spiegeln zu stark den persönlichen Geschmack des Autors wider und erfordern distanziertes Lesen („FORTRAN is not suitable for use with microcomputers“; „In going from microcomputers (i.e. PCs) to minicomputers we gain little, if anything“; „the mouse is one of the silliest inventions which has ever captured the fancy of anyone“).

Das Buch enthält viel Nützliches für einen guten Anfängerkurs, allerdings nur wenig aus den Bereichen Datenbanken und Textverarbeitung. Das Buch ist übrigens mit einem sehr einfachen Textsystem geschrieben (keine Sonderzeichen, kein Blocksatz, keine Worttrennung); die Schreibmaschinenseiten sind nicht frei von Tippfehlern. Der damit verglichen horrende Preis wird von Studenten, an die sich dies Buch ja wohl richten wollte, sicher nicht geopfert. Vergleichbare Bücher sind zu wesentlich niedrigeren Preisen auf dem Markt.

*W. H. Eugen Schwarz* [NB 959]  
Institut für Theoretische Chemie  
der Universität-Gesamthochschule Siegen

**Combination Effects in Chemical Carcinogenesis.** Von *D. Schmähl*. VCH Verlagsgesellschaft, Weinheim/VCH Publishers, New York 1988. 279 S., geb., DM 128.00. – ISBN 3-527-26742-50/0-89573-670-5

In diesem schmalen, sorgfältig hergestellten Band werden neuere Arbeiten über Kombinationseffekte von Chemikalien bei der Carcinogenese von Mitarbeitern des Deutschen Krebsforschungszentrums zusammengefaßt. Einige Leser hätten sich verständlicherweise wohl einen vollständigen Überblick über das gesamte Arbeitsgebiet gewünscht, doch sollte man sich vor Augen halten, daß dies wegen der umfangreichen Literatur, der beträchtlichen Anzahl an zweifelhaften und nicht weiterführenden Informationen und der Notwendigkeit zur Konzentration auf die Art der Wechselwirkungen eine kaum zu bewältigende Aufgabe ist. Dieser Band ist ein guter Anfang, da eine umfangreiche Sammlung wichtiger Ergebnisse detailliert besprochen wird.

Über die Entstehung von Krebs sind in den letzten zwanzig Jahren viele Informationen zusammengetragen worden, die für das Verständnis der Wechselwirkungen von Chemikalien bei der Carcinogenese von großem Wert sind. Die Bedeutung der metabolischen Aktivierung und des Nutzens von Genotoxizitätstests wird in eigenen Kapiteln recht ausführlich behandelt. Es fehlt dagegen ein Überblick über die Relevanz anderer Faktoren, z.B. des Zellwachstums, das durch hormonähnliche Effekte, Cytotoxizität mit anschließender Regeneration, immunotoxische Effekte, physiologische Pharmakokinetik oder Kooperation von Zelle zu Zelle ausgelöst werden kann. Das heißt, die meisten Themen werden unter dem Gesichtspunkt behandelt, was passiert, wenn zwei oder mehr Chemikalien bei der Bildung von Tumoren zusammenwirken, und nicht unter dem Gesichtspunkt, warum dies passiert. Einige für die Entwicklung dieses Arbeitsgebiets bemerkenswerte Beiträge werden übergegangen. Bei den Betrachtungen zur Bildung von Tumoren in der Mäusehaut fehlen beispielsweise die klassischen Arbeiten von *Berenblum* und *Shubik*, die für den zweistufigen Prozess Wechselwirkungen zwischen einer Vielzahl von Reagenten nachweisen. Ebenso werden die jüngsten Arbeiten von *Slaga* und von *Kinsel* nicht erwähnt; sie weisen darauf hin, daß die Entstehung dieser Tumoren möglicherweise drei Stadien umfaßt, von denen jedes durch eine andere Chemikalie ausgelöst wird. Wegen solcher Informationslücken ist das Buch eher für Wissenschaftler mit Erfahrungen auf dem Gebiet der chemischen Carcinogenese als für Studenten und Wissenschaftler mit geringerem Hintergrundwissen geeignet.

Die einzelnen Themen des vorliegenden Buches sind sehr gut ausgearbeitet, und bei den grundlegenden Ergebnissen wird eine Fülle von Tabellen und Abbildungen aufgeboten. Die vorgestellten Wechselwirkungen von Chemikalien sind von weitreichender Bedeutung für die Praxis und betreffen viele wichtige Bereiche der Umwelt des Menschen. So wer-