

lern und Übersetzern die Möglichkeit, beide Ziele zu erreichen.

Natürlich ist TransDict kein Programm, das einen Text durch einen Tastendruck in mehrere Sprachen übersetzt. Das vollautomatische Übersetzen in druckreifer Qualität ist sicherlich ein reizvolles Ziel, aber sogar das „Fifth Generation Computer Project“ der Japaner hat es noch nicht geschafft, ein Programm zu entwickeln, das alle Bedürfnisse der Wissenschaftler erfüllt.

TransDict ist im Grunde ein Textverarbeitungsprogramm, das zusätzlich das Erstellen und Durchsuchen elektronischer Wörterbücher und Karteikästen („card files“) anbietet. Notwendig dafür ist ein Computer mit MS-DOS-Betriebssystem (mindestens Version 2.1), einem Hauptspeicher von 640 Kilobytes, einer Festplatte (20 Megabytes) und einer Graphikkarte. Die Menüs, die nach dem Pull-down-Prinzip funktionieren, bieten dem Benutzer die Möglichkeit, Texte einzulesen, zu speichern und auszudrucken, an mehreren Texten (Fenstern) gleichzeitig zu arbeiten, Textteile zu markieren, zu formatieren und innerhalb des Textes zu verschieben, Wörter zu suchen und zu ersetzen, Tabellen zu erstellen, den Bildschirm und den Drucker zu steuern, einfache Rechenoperationen durchzuführen, Folgen von Befehlen gleichzeitig auszuführen (Makros) sowie das Betriebssystem zu benutzen. Kurz gesagt bietet TransDict die Grundelemente eines Textverarbeitungsprogramms. Über die Tastatur kann man die meisten Befehle noch schneller ausführen. Die entsprechenden Tasten werden links oben am Bildschirm gezeigt, wenn das Befehlsmenü aktiviert wird. Über einen „Hilfe-Befehl“ kann eine Erklärung der meisten Befehle angefordert werden.

Das Menü für die Wörterbücher erscheint beim Drücken der Alt-W-Kombination. Im ausgewählten Wörterbuch wird dann nach einem bestimmten Wort oder Begriff gesucht. Alternativ dazu lassen sich Wörter nach phonetischen Kriterien suchen; zum Beispiel werden die Wörter Hofman, Hoffmann, Hofmann, Hoffmann gleich behandelt. Ein Durchblättern der Wörterbücher („scrolling“) ist aber auch möglich. Ein auf Disketten gespeichertes Wörterbuch wird mit TransDict mitgeliefert. Andere elektronische Wörterbücher müssen separat gekauft werden. Ein Langenscheidts deutsch-englisches Wörterbuch und das deutsch-englische parat Wörterbuch Informationstechnologie sind bereits vorhanden; andere Wörterbücher sind in Vorbereitung. Zusätzlich können elektronische Karteikästen angelegt und in derselben Weise durchsucht werden. Jede Karteikarte enthält maximal 255 Zeichen, die auf zehn Zeilen mit höchstens 60 Zeichen verteilt werden. So lassen sich die Karteikarten den persönlichen Bedürfnissen des Benutzers anpassen. Mit TransDict können auch Listen von Wörtern durch die Wörterbuch-Funktion gespeichert und mit einem Zusatzprogramm alphabetisch geordnet werden. Solche Listen wie auch die Karteikästen sind sehr nützlich für Autoren, die einen persönlichen (und hoffentlich guten) Stil in einer Fremdsprache zu entwickeln versuchen.

Das Zusatzprogramm TDRES ermöglicht es, sowohl die Wörterbücher als auch die Karteikästen mit anderen gängigen Textverarbeitungsprogrammen wie Microsoft Word oder Wordstar zu verwenden. Da viele Autoren an ein bestimmtes Programm gewöhnt sind, ist TDRES sehr wertvoll. Es sollte separat – und etwas billiger! – angeboten werden. Außerdem wären eine englische Version von TransDict sowie eine für den Macintosh-Computer geeignete Version von Nutzen.

TransDict ist kein Ersatz für das Erlernen einer Fremdsprache; Grammatik und Satzbau muß der Benutzer schon kennen. Das Programm ist auch keine Garantie für die korrekte Verwendung von Wörtern und Redensarten. Nur

durch breitgefächerte und aufmerksame Lektüre fremdsprachlicher Texte kann die Kunst des Schreibens erlernt werden. Ferner sind zuverlässige und aktuelle Fachwörterbücher notwendig. TransDict ermöglicht aber den schnellen Zugriff zu notwendigen Wörtern, Phrasen und Konzepten und erleichtert so das Übersetzen wissenschaftlicher Manuskripte. Auch Wissenschaftler, die die erste Version ihrer Manuskripte z. B. auf Englisch verfassen wollen, werden das Programm nützlich finden.

Der Übersetzungsprozeß wird ausführlicher in einem von *John Biguenet* und *Rainer Schulte* herausgegebenen Buch behandelt (*The Craft of Translation*, University of Chicago Press, Chicago 1989). Diese ausgezeichnete Sammlung von Essays über die Probleme, die mit dem Übersetzen von Literatur zusammenhängen, enthält auch einen Beitrag über das Übersetzen der Gedichte von *Paul Celan*. Der Autor *John Felstiner* schreibt, daß das Übersetzen von *Celan* – oder von jedem anderen Dichter – die gesamten Mittel analytischer Kritik erfordert. Oft wird gesagt, daß in jedem Wissenschaftler auch ein wenig von einem Dichter stecke. Wo dies zutrifft, wird der Übersetzungsprozeß sicherlich nicht weniger anspruchsvoll, wohl aber interessanter sein.

David I. Loewus [NB 1099]
Angewandte Chemie, Weinheim

Organische Chemie für Ingenieure. Von *G. Fischer*.
McGraw-Hill, Hamburg 1990. 234 S., Broschur
DM 39.00. – ISBN 3-89028-215-6

Wie vermittelt man ein Fachgebiet an fachfremde Leser, ohne zu sehr in die Tiefe zu gehen und dadurch die ohnehin schon vorhandene Hemmschwelle noch zu erhöhen, aber auch ohne durch zu große Idealisierung von Sachverhalten sinnverfälschend zu wirken? Ein bewährtes Rezept ist, den Inhalt der gängigen Lehrbücher in komprimierter, jedoch möglichst exakter Form darzustellen und einige die fachfremde Leserschaft besonders interessierende Teilbereiche breiter hervorzuheben; diesem Weg folgt auch *Günter Fischer* in dem vorliegenden Buch „Organische Chemie für Ingenieure“. Zunächst werden in drei kurzen Abschnitten die Einteilung der organischen Verbindungen (5 Seiten), die Bindungsarten (9 Seiten) und die räumlichen Strukturen von Molekülen (9 Seiten) behandelt. Im 4. Kapitel (74 Seiten) wird ein knapper Überblick über die chemischen Eigenschaften organischer Verbindungen, eingeteilt nach Strukturelementen der Stammverbindung (Alkane, Alkene etc.) sowie nach funktionellen Gruppen, gegeben. Grundlegende Reaktionsmechanismen werden im 5. Kapitel (46 Seiten) besprochen, wobei ein Schwerpunkt auf die für technische Verfahren bedeutsamen radikalischen Reaktionen (Chlorierung, Sulfochlorierung, Cracking) gelegt wird. Den Mechanismen von Oxidationen und Reduktionen ist ein eigener kurzer Abschnitt (12 Seiten) gewidmet. Einen zweiten Schwerpunkt des Buches bilden Chemie und Eigenschaften von Kunststoffen (58 Seiten). Zum Abschluß wird ein kurzer Überblick über Gefahren beim Umgang mit Chemikalien und Arbeitsschutz (10 Seiten) gegeben.

Die Auswahl des auf 230 Seiten komprimierten Stoffes erscheint ausgewogen und sollte es Nichtchemikern ermöglichen, einen Einblick in die wichtigsten Aspekte der Organischen Chemie zu gewinnen; einige Abschnitte, z. B. der über Hybridisierung, sind beispielhaft. Es fällt positiv auf, daß unter Umweltgesichtspunkten wichtige, dem Laien häufig begegnende Begriffe wie Dioxine, DDT, PCBs etc. an passender Stelle im Text erläutert werden. Gleichfalls gut gelungen sind die besonders an die potentielle Leserschaft gerichteten

Abschnitte über technische Verfahrensweisen, die vor allem im 4. und 7. Kapitel eingestreut sind. Die Formelschemata sind im allgemeinen übersichtlich und gut lesbar.

Leider wird dieser an sich positive Eindruck durch eine ganze Reihe von Schwachpunkten getrübt. Weniger ins Gewicht fallen hier die wohl unvermeidlichen, aber vom Leser leicht erkennbaren Fehler wie falsche Atomsymbole in Formelschemata (S. 131, 175), beim Umbruch verstümmelte Sätze (S. 98) sowie vertauschte Begriffe (z. B. S. 48: Darstellung von Chlorbenzol durch *Hydrierung* von Benzol). Gravierender ist hier die an einigen Stellen unpräzise Wortwahl des Autors („selektives Lösemittel“, „katalytischer Wasserstoff“), die gerade beim Nichtchemiker, an den sich das Buch ja wendet, falsche Vorstellungen erzeugen kann. Auf S. 112 wird das ein Substrat angreifende Teilchen als *Substituent* definiert; auf derselben Seite findet sich die Feststellung: „Jede organische Reaktion besteht aus mehreren Teilschritten“, woraufhin die einstufige S_N2 -Reaktion vorgestellt wird. Leider setzt sich dieser Trend auch bei der Behandlung von Reaktionsmechanismen fort; ein besonders krasses Beispiel ist der Mechanismus der Veresterung einer sterisch nicht gehinderten Carbonsäure über Acylium-Ionen (S. 174). Unverständlich ist weiterhin der sorglose Umgang des Autors mit der chemischen Nomenklatur. Dabei spannt sich der Bogen von der überreichlichen Verwendung von Bindestrichen („Lithium-aluminium-hydrid“) über die falsche Nummerierung in Molekülen (TCDD, S. 58) bis zur gleichfalls inkorrechten Angabe der Bezifferung von Substituenten am Ende des Namens (Buten-1 etc.). So findet man für 2-Propanol etwa zu gleichen Teilen die Bezeichnungen Propanol-2, i-Propanol und Isopropanol, die letzten *beiden* auch im Index!

Wie im inzwischen wohl endgültig angebrochenen Zeitalter des Desktop-Publishing üblich, wurde das Typoskript offensichtlich mit Hilfe eines Textverarbeitungsprogramms erstellt und direkt reproduziert. Während man über die Vorteile und Nachteile der verschiedenen Programme wohl endlos diskutieren kann (das hier verwendete produziert viel zu sperrige Überschriften und Indices!), so bleibt unverständlich, warum für den Ausdruck des Textes ein Matrixdrucker anstelle eines Laserdruckers verwendet wurde; dieser (geringe) Mehraufwand hätte den Augen des Lesers an mancher Stelle gutgetan. In Anbetracht all dieser Mängel kann das vorliegende Buch nur sehr bedingt empfohlen werden.

Norbert Krause [NB 1073]

Institut für Organische Chemie
der Technischen Hochschule Darmstadt

Computer-Aided Molecular Design. Herausgegeben von W. G. Richards. IBC Technical Services, London 1989. VII, 266 S., geb. £ 95.00. – ISBN 1-85271-054-3

Computerunterstütztes Protein-Design hat in den letzten Jahren ein großes Interesse sowohl im industriellen als auch im akademischen Bereich gefunden. Anwendungs- („Drug Design“) und grundlagenorientierter Forschung (Verständnis von Struktur/Wirkungs-Beziehungen) eröffnen sich hier faszinierende Möglichkeiten. Während ein durchgängig geschriebenes Werk zu diesem Thema wohl wegen der Heterogenität der benötigten Methoden noch aussteht, gibt es bereits eine Anzahl von Symposiumsberichten, die das Thema aber zwangsläufig unvollständig und nur punktuell behandeln. Im vorliegenden Band wird nun mit Beiträgen verschiedener Autoren, die aus mehreren von IBC veranstalteten „European Conferences on Computer-Aided Molecular Design“ stammen, der Versuch unternommen, das Thema er-

schöpfend zu behandeln. Dies hat aber zur Folge, daß manche Artikel mehrere Jahre alt sind und neuere Entwicklungen nicht mehr erfaßt werden.

Im Vorwort wird erwähnt, daß sich das Werk sowohl an Neulinge als auch an solche Wissenschaftler wendet, die ihr Arbeitsgebiet erweitern wollen. Dies ist eine Umschreibung der Tatsache, daß die Autoren in ihren Beiträgen sehr unterschiedliche Konzepte verfolgt haben. Während in manchen Kapiteln (z. B. 1, 2 und anderen) versucht wird, einen Überblick über ein Teilgebiet zu geben, werden in anderen (z. B. 9 und 11) spezielle Bereiche, diese jedoch alles andere als erschöpfend, behandelt. Gleches gilt für die in den einzelnen Beiträgen zitierte Literatur, die in einigen Fällen nur wenig über die eigenen Arbeiten des Autors hinausgeht, in anderen aber eine repräsentative Übersicht darstellt.

In den 21 Kapiteln des Buches werden tatsächlich weite Bereiche des Moleküldesigns erfaßt. So bietet Kapitel 1 (*Murray-Rust*) einen Überblick über die international vorhandenen Strukturdatenbanken, und in Kapitel 2 findet der Leser eine ausgezeichnete Einführung in die Kraftfeldmethoden; Anwendungen quantenmechanischer Verfahren, insbesondere bei der Simulation aktivierter Enzymkomplexe, werden in Kapitel 3 und „Free-Energy-Perturbation“-Methoden in Kapitel 4 beschrieben.

Kapitel 5 bietet einen kurzen summarischen Abriß über die „Distance-Geometry“-Methode, die heute bei NMRspektroskopischen Untersuchungen von Proteinen häufig zur Entwicklung einer Startstruktur verwendet wird. Ein allgemeiner Überblick über die Ermittlung räumlicher Strukturen von Proteinen in Lösung durch NMR-Spektroskopie findet sich in Kapitel 17 (*Clore, Gronenborn et al.*) und auschnittsweise in einem kurzen Kapitel 16 (*Wüthrich et al.*).

In Kapitel 6 werden einige Aspekte der im Moment nur von vergleichsweise wenigen Arbeitsgruppen benutzten Methoden der symbolischen Beschreibung und Analyse von Molekülkonformationen erläutert.

Einen ausgezeichneten Überblick über die beim Drug-Design verwendeten Konzepte liefert *Marshall* in Kapitel 8; *Müller et al.* (Kap. 10) geben dazu eine interessante konzeptionelle Alternative; methodische Aspekte werden auch in Kapitel 12 von *Goodford* beschrieben.

Bei der Strukturvorhersage und beim Design von Proteinen, die selbst heute nur basierend auf der bekannten räumlichen Struktur eines homologen Proteins möglich sind, treten völlig andere Probleme als bei niedermolekularen Substanzen auf. Hier weist der vorliegende Band weite Lücken auf. Die verwendeten Verfahren werden leider nur sehr summarisch und unvollständig in Kapitel 13 präsentiert. Einige Aspekte der Protein-Darstellung auf schnellen Graphik-Workstations werden in Kapitel 14 erläutert, ein Verfahren zur Identifizierung und Einordnung antigener Bereiche in Proteinen wird in Kapitel 15 beschrieben.

Die letzten Beiträge befassen sich mit Anwendungen des Moleküldesign in Gebieten, in denen diese Methode erst seit sehr kurzer Zeit genutzt wird, nämlich in der Materialwissenschaft (mikroporöse Materialien, Kap. 18, Materialien allgemein, Kap. 21) und der Katalysatorforschung (Zeolithe, Kap. 19, heterogene Katalyse, Kap. 20).

Am Schluß des Buches finden sich auf 16 Seiten etwas zusammenhanglos die zu den Beiträgen gehörigen Farbtafeln. Dies mag zwar drucktechnisch preisgünstiger sein, beim Lesen ist es allerdings etwas umständlich.

Die hier nicht erwähnten Kapitel 7, 9 und 11 passen eigentlich nicht in das Konzept des Bandes, da sie spezielle Anwendungen und nicht allgemein verfügbare Software beschreiben.

Sicherlich ist das Buch nicht das aus einem Guß geschriebene Werk, das ein solches Thema verdiente; die Artikel sind