

analytischen Phase bei arbeitsmedizinisch-toxikologischen Untersuchungen von Blut und Urin gewidmet. Zwei Referate zur Probenaufbereitung zeigen die Bedeutung von Extraktion und Clean-up für die Rückstandsanalyse von organischen Substanzen in unterschiedlichen Matrices. In den Referaten zu den analytischen Methoden werden sowohl immunologische Methoden zum Nachweis von Atrazin als auch moderne chromatographische Methoden vorgestellt. Die Intention, sich einer breiten Öffentlichkeit vorzustellen, erfüllt die DFG mit diesem Bericht sehr gut, denn die Referate beschreiben anschaulich anhand zahlreicher Beispiele die Probleme der Spurenanalytik und ihre möglichen Lösungen. Dadurch wendet sich der Bericht nicht nur an ausgebildete Analytiker, sondern ist so verfaßt, daß er einem großen Kreis interessierter Leser zugänglich ist. Die Vorstellung modernster analytischer Methoden aus dem Bereich der Biochemie sowie der modernen instrumentellen Analytik machen deutlich, welchen technischen Stand die Analytik erreicht hat. Daß ein hoher technischer Standard jedoch noch keine richtigen Analysenergebnisse garantiert, sondern nur einen Teilschritt zum Analysenergebnis hin ist, machen die Referate zur Qualitätssicherung deutlich. Hier ist besonders die kurze aber informative Einführung in die GLP hervorzuheben.

Der Interpretation von Analysenergebnissen und der Festlegung von Grenzwerten sind in einem gesonderten Kapitel weitere interessante Artikel gewidmet. Dieses Kapitel schließt ab mit einer Diskussion zum Thema „Möglichkeiten und Grenzen der Analytik“. Die Wiedergabe dieser kontroversen und informativen Diskussion ist gelungen und auch für den Leser nachvollziehbar.

Das Buch wird abgeschlossen durch die Wiedergabe eines Roundtable-Gesprächs zum Thema „Analytik im Rahmen der Kommissionsaufgaben – nationale und internationale Entwicklung“. In diesem Kapitel werden elf Statements von Vertretern der Legislative, Exekutive und den Vorsitzenden der Arbeitsgruppen aneinandergereiht. Die Wiedergabe der abschließenden Diskussion ist, wie das gesamte letzte Kapitel, nicht befriedigend gelöst. Zusammengefaßt ist das vorliegende Buch jedoch ein gelungener Versuch, sowohl die Arbeitsergebnisse der DFG-Senatskommissionen als auch die Bedeutung der Analytik für Mensch und Umwelt einer breiten Öffentlichkeit verständlich darzustellen.

Wolfgang Kleiböhmer [NB 1183]

Institut für Chemo- und
Biosensorik Münster

Enzymkinetik. Eine elementare Einführung mit computersimulierten Experimenten. Buch und Diskette. Von J. Lüthje. Urban & Schwarzenberg, München 1990. 201 S., Broschur DM 78.00. – ISBN 3-541-12631-0

Das vorliegende Buch präsentiert die Grundlagen der Kinetik und Enzymkinetik. Das Werk vermittelt dem Leser auch die Möglichkeit, Experimente mit einem Computerprogramm, das zum Buch gehört, zu simulieren. Damit können auch die im eigenen Labor bestimmten Meßwerte ausgewertet werden.

Im ersten Kapitel werden Grundbegriffe wie Geschwindigkeitskonstante, Gleichgewichtskonstante, Reaktionsordnung sowie die Molekularität einer chemischen Reaktion erklärt. Jeder Begriff ist zusätzlich anhand einer graphischen, computersimulierten Darstellung erläutert. Mit der Einführung des Begriffs Katalyse ist der Sprung zur Enzymkatalyse gemacht. Normalerweise sollte man an dieser Stelle die Struktur eines Enzyms und dessen aktives Zentrum be-

schreiben, aber diese Begriffe werden erst später und nicht sehr deutlich beschrieben. Ein vom Computer dargestelltes Modell des Enzym-Substrat-Komplexes wäre für das Verständnis der Enzymkatalyse von Vorteil gewesen. Das gilt auch für die „induced fit“- und die „Schlüssel-Schloß“-Theorie.

Mit der Ableitung des sogenannten „rapid equilibrium approach“ ist die nun klassische Michaelis-Menten-Beziehung geschaffen. Anschließend ist auch der „steady-state-approach“, der von Briggs und Haldane erstmals 1925 formuliert wurde, erklärt sowie die Bedeutung der einzelnen Größen der Geschwindigkeitsgleichung für den Ablauf der Gesamtreaktion. Leider hat der Autor von den zahlreichen Beispielen aus der Praxis keines aufgeführt und damit eine gute Möglichkeit verpaßt, die Bedeutung der Enzymkinetik darzulegen. An dieser Stelle wäre es gut, die Multienzymkomplexe zu erwähnen, wobei das Produkt einer enzymatischen Reaktion das Substrat für das nächste Enzym ist. In diesem Kontext wäre auch die Beschreibung der Kinetik allosterischer Enzyme, die sehr wichtig für die Regulation des Stoffwechsels sind, sinnvoll. Dieser Teil wird beendet mit der Bestimmung von K_m und v_{max} mit Hilfe von Lineweaver-Burk-, Eadie-Hofstee-, Hanes-Woolf- oder Cornish-Bowden-Darstellungen.

Im letzten Teil des Buches werden die Grundlagen der Enzymhemmung eingeführt. Klassische Begriffe wie kompetitive, nichtkompetitive und unkompetitive Hemmung sind mit zahlreichen Gedankenexperimenten lebendig gemacht. Das Buch kann für Studenten und Lehrer im enzymologischen Praktikum empfohlen werden.

Aurel Popa-Wagner [NB 1184]

Institut für Organische Chemie
der Universität Karlsruhe

Chemometrics. Applications of Mathematics and Statistics to Laboratory Systems. Von R. G. Brereton. Ellis Horwood, Chichester 1990. 307 S., geb. \$ 76.50. – ISBN 0-13-131350-9

Die Monographie, erschienen als separater Band der „Ellis Horwood Series in Chemical Computation, Statistics and Information“, verfolgt das Ziel, den im Labor tätigen Chemiker mit den Möglichkeiten und Vorteilen der Anwendung chemometrischer Methoden vertraut zu machen.

Hauptanliegen des Buches ist es, an einfachen Beispielen das Prinzip der jeweiligen chemometrischen Methode kurz darzustellen und die Anwendung auf konkrete chemische und analytische Fragen zu demonstrieren. Dabei ist es vorteilhaft, daß das Verständnis der mathematischen und statistischen Methoden im Vordergrund steht. Bezüglich der rechentechnischen Lösung wird häufig auf die in großer Vielfalt und meist ausreichender Qualität kommerziell erhältliche Software verwiesen. Nach einer kurzen Darstellung der Entwicklung der Chemometrik wird einleitend auf die aktuelle chemometrische Literatur verwiesen. In den folgenden sechs Kapiteln werden in übersichtlicher Gliederung die wesentlichen chemometrischen Methoden und ihre Anwendung vorgestellt.

Im Kapitel über experimentelles Design werden sequentielle Methoden wie die Simplexoptimierung, Faktorenpläne, Methoden der multilineararen Regression und der Varianzanalyse zur quantitativen Modellierung und Optimierung chemischer Experimente genutzt. Anschließend werden etablierte (Kontrollkartentechnik, Cusum-Methode, Autokorrelationsanalyse) und neuere (Autoregressives gleitendes Mittel, Variogramm, Kriging, Niquist-Frequenz) Methoden

als Hilfsmittel zur Untersuchung von Zeitreihen in der Chemie und zur Lösung des komplizierten Problems der repräsentativen Probenahme vorgestellt. Im vierten Kapitel werden die verschiedensten Methoden wie die Hauptkomponentenanalyse, die Informationstheorie, Klassifikationsverfahren, Simplexverfahren, Fourier- und Hadamard-Transformation zur Auswahl und Optimierung analytischer Bedingungen angewendet. Die beiden folgenden Kapitel befassen sich mit der Anwendung uni- und multivariater Methoden zur Signalbehandlung. Daß es dabei zu Überschneidungen mit vorausgegangenen Darstellungen (Fourier-Transformation, Hauptkomponentenanalyse) kommt, resultiert zwangsläufig aus der vielseitigen Einsetzbarkeit chemometrischer Methoden. Aus dem Bereich der univariaten Signalbehandlung sind Methoden der gleitenden Mittelwertsbildung, der Signalentfaltung sowie der Kalman-Filterung beschrieben. Die Darstellungen zur Faktorenanalyse als Instrument der multivariaten Signalbehandlung lassen Ausführungen zur Kommunalitätenschätzung vermissen; auf die moderne Methode der Target-Transformations-Faktorenanalyse wird kurz eingegangen. Im Teilabschnitt über die multivariate Kalibration werden wichtige Regressionen mit latenten Variablen wie Hauptkomponenten- und PLS-Regression genannt, jedoch nur kurz beschrieben.

Im abschließenden Kapitel zur Mustererkennung werden Methoden des Lernens ohne Lehrer, insbesondere Algorithmen der Clusteranalyse, und des Lernens mit Lehrer mit „harten“ (Lineare Diskriminanzanalyse, Lineare Lernmaschine, K-Nächste Nachbarn) und „weichen“ (SIMCA) Techniken sowie FUZZY-Methoden in guter Nachvollziehbarkeit angewendet.

Der kurze Anhang zu wichtigen mathematischen Operationen sollte vom Leser durch das Studium entsprechender Monographien der mathematischen Statistik ergänzt werden. Vermißt wird die Anwendung von Methoden der robusten Statistik.

Die Gestaltung des Buches in drucktechnischer Sicht ist, abgesehen von wenigen Ausnahmen (Gl. 3.5, Tabelle 5.20), korrekt und sehr übersichtlich. Die vorliegende Monographie bietet mit ihrer übersichtlichen Gliederung und den leicht überschaubaren und charakteristischen Anwendungsbeispielen aus Chemie und Analytik eine gute Grundlage für die „Chemometrik-einstiegswilligen“ experimentell tätigen Chemiker; auch wer bereits Mathematik und Statistik in seinem Arbeitsfeld anwendet, findet neue Anregungen zur Nutzung chemometrischer Methoden.

Jürgen Einax [NB 1174]

Institut für Anorganische und
Analytische Chemie der
Universität Jena

Elektrophorese-Praktikum. Von R. Westermeier. VCH Verlagsgesellschaft, Weinheim 1990. XV, 279 S., geb. DM 68.00. – ISBN 3-527-28172-X

Absicht des vorliegenden Buches ist, den Leser schrittweise mit der Praxis mehrerer Elektrophoresemethoden vertraut zu machen. Dazu führt der Autor, nach Vermittlung des nötigen Basiswissens, den Leser (und Mitarbeiter!) in einem Kurs von elf Praktikumsversuchen durch die Anwendungsbereiche und Methodiken moderner Elektrophorese.

Das Buch beginnt mit der obligaten Vorstellung der prinzipiellen Grundlagen und einem Überblick über die Hauptgruppen der Elektrophorese. Zonenelektrophorese in restriktiven und nichtrestriktiven Medien, Isotachophorese und Isoelektrische Fokussierung sind in jeweils eigenen Kapi-

teln ausführlich dargestellt. Dabei werden Materialarten und -parameter, Substanzklassen der Proben und Parameter des Trennungslaufes diskutiert. Auch besondere Anwendungen, z. B. Elektrophorese im gepulsten Feld, werden verständlich erläutert. Der Autor stellt im Kapitel über nichtrestriktive Agarose-Gelelektrophorese die Immun- und Affinitätselektrophorese vor, zur restriktiven Agarose-Gelelektrophorese kommt die „Pulsed-Field-Technik“ (PFG), im Kontext der Polyacrylamid-Gelelektrophorese (PAGE) das Prinzip der DNA-Sequenzierung. Leider zerreißen diese Exkurse die Systematik. Die stellenweise mangelnde Übersichtlichkeit konnte auch durch die Verwendung einer Kommentarspalte und guter, teils farbiger Illustrationen nicht wieder hergestellt werden.

Die Isotachophorese wird kurz abgehandelt. Die Isoelektrische Fokussierung (IEF), mit Trägerampholyten und immobilisierten pH-Gradienten (IPG), schließt mit Ausblicken auf präparative IEF und die Titrationskurvenanalyse.

In logischer Folge der Arbeitsabläufe schließt sich nun das Blotting an. Nach einer prinzipiellen methodischen Übersicht werden Membranen, Puffer, Färben, Blockieren und Spezi-Detektionen in zahlreichen Varianten jeweils kurz vorgestellt.

Im folgenden Kapitel stellt der Autor die Komponenten eines Elektrophorese-Arbeitsplatzes und die jeweiligen apparativen Alternativen dar. Spannungsversorger, Vertikalkammern und DNA-Sequenzierkammern, Horizontalkammern und PFG-Submarine-Kammern werden illustriert und knapp kommentiert; ein Komplettsystem wird etwas ausführlicher erläutert. Sicherheitshinweise bilden den Abschluß.

Die Auswertung von Elektropherogrammen durch Densitometrie rundet den theoretischen Teil des Buches ab. Anwendungsbereiche, Optik eines Densitometers, Integration und Auswertung der Densitogramme werden diskutiert.

Der Kursteil, der zwei Drittel des gesamten Umfangs einnimmt, beginnt mit einer tabellarischen Zusammenstellung des allgemein und für die jeweiligen Versuche nötigen Materials. Die folgenden elf Versuche, die nach steigendem Aufwand geordnet sind, lassen sich alle mit einem Horizontalkammersystem durchführen. Die Anleitungen sind der Zielsetzung gemäß protokollarisch genau. Jeder Versuch ist auch bei Wiederholungen vollständig, Zusammenstellung und Abfolge sind daher zum Aufbau eigener Praktika frei wählbar.

Die Gesamtheit der praktischen Arbeiten deckt fast das ganze Gebiete der Elektrophorese ab. Als Proben dienen neben Proteinen auch Oligonukleotide und niedermolekulare Farbstoffe. Polyacrylamid- und Agarosegele werden selbst gegossen, Polyacrylamidgele gegebenenfalls rehydratiiert. Probenvorbereitung und Bedingungen des Laufes werden für den Standard- und native PAGE, ebenso wie für Immunelektrophorese, Titrationskurvenanalyse und 2D-Elektrophorese beschrieben. IEF wird sowohl mit Trägerampholyten als auch mit IPGs durchgeführt. Mehrere Varianten der Coomassie-Färbung, Silberfärbung und Densitometrie werden im Kontext der speziellen Verfahren beschrieben. Dem Semidry-Blotting ist ein eigener Versuch gewidmet.

Im Anhang werden tabellarisch, nach Methode und Arbeitsschritt geordnet, Symptome, Ursachen und Abhilfe bei einer Vielzahl möglicher Fehler aufgelistet. Die Literaturliste erhebt mit ca. 135 Einträgen keinen Anspruch auf Vollständigkeit. Dagegen erleichtert das ausführliche Stichwortregister die Nutzung des Buches auch als Nachschlagewerk.

Trotz Schwächen in Übersichtlichkeit und Systematik des theoretischen Teils gewinnt das Buch durch Einbeziehung auch moderner Techniken und Anwendungen. Die Stärke