

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 Analyseergebnisse garantiert, sondern nur ein Teilschritt zum Analyseergebnis hin ist, machen die Referate zur Qualitätssicherung deutlich. Hier ist besonders die kurze aber informative Einführung in die GLP hervorzuheben.

Der Interpretation von Analyseergebnissen 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. Lütjhe. Urban & Schwarzenberg, München 1990. 201 S., Broschur DM 78.00. – ISBN 3-541-12 631-0

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 rechen-technischen Lösung wird häufig auf die in großer Vielfalt und meist ausreichender Qualität kommerziell erhältliche Software verwiesen. Nach einer kurzen Darstellung der Entwicklung der Chemometrie 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 multilinenen 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