

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 Mittelwertbildung, der Signalentfaltung sowie der Kalman-Filterung beschrieben. Die Darstellungen zur Faktorenanalyse als Instrument der multivariaten Signalbehandlung lassen Ausführungen zur Kommunalitätsschätzung 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 Anwendungsgebiete 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 Spezial-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 Oligonucleotide und niedermolekulare Farbstoffe. Polyacrylamid- und Agarosegele werden selbst gegossen, Polyacrylamidgele gegebenenfalls rehydratisiert. 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, Silberfärben 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

liegt klar auf der praktischen Seite, dabei weniger als Referenz denn als umfassender Kurs für Einstieg oder Weiterbildung.

Hartmut Drechsel [NB 1143]
Institut für Organische Chemie
der Universität Tübingen

Bonding and Structure: Structural Principles in Inorganic and Organic Chemistry (Reihe: Inorganic Chemistry; Reihenherausgeber: J. Burgess). Von N. W. Alcock. Ellis Horwood, Chichester 1990. 321 S., geb. \$ 50.95. – ISBN 0-13-465253-3

Die einleitenden Betrachtungen in einem Buch über chemische Bindung und Strukturen sind durchaus motivierend, wenn in einem Kapitel „The evidence“ eine klare Position bezogen wird: Alles was wir wissen wollen, sind die Atomlagen im Raum und die damit verbundene Gesamtenergie. Auf den ersten 40 Seiten erhält der Leser einen schnellen und guten Überblick darüber, auf welche experimentellen Weisen Strukturinformationen gewonnen werden können (Röntgenbeugung, NMR, IR, Elektronenbeugung, Neutronenbeugung etc.) und mit welchen Strukturphänomenen zu rechnen ist. Schon dabei fallen zwei Dinge auf: 1) Es dominieren von Anfang an die Kristallstrukturen; 2) Die Quantenchemie, die inzwischen als recht zuverlässige Methode zur Bestimmung von Molekülstrukturen nicht mehr zu übersehen ist, wird ignoriert. Der Autor hält sein im Titel des Buches gegebenes Versprechen nicht und befaßt sich im wesentlichen mit anorganischer Festkörperchemie.

In einem 100 Seiten starken Kapitel mit dem Titel „Ideal bonds“ werden Eigenschaften der metallischen, ionischen und kovalenten Bindung beschrieben. Grundlegendes aus der Quantenmechanik wird extrem kurz und unklar präsentiert. Der LCAO-Begriff wird mit wenigen Zeilen erledigt. Bei den Wasserstoffeigenfunktionen werden reelle und komplexe Darstellungen vermischt. Die 1s-Funktion wird mit

$$\psi(r) = 2a_0 - 6.5 \exp(-r/a_0) \quad (?)$$

angegeben und sogar noch eingerahmt. Eine der d-Funktionen wird zwar richtig gezeichnet, aber mit d_z^2 fortlaufend falsch geschrieben. Wie sollte daraus die konische Knotenfläche entstehen? Wasserstoff als Molekülkation wird bald als H_2^+ , dann aber über mehrere Seiten hinweg als H_2^+ geschrieben. Ferner tummeln sich Druckfehler aller Art. Ebenfalls eingerahmt findet man den Satz: „The probability of finding an electron at a given point is given by ψ^2 “. Wahrscheinlichkeit und Wahrscheinlichkeitsdichte werden also nicht unterschieden, und die Bedeutung des Volumenelements $d\tau$ fällt dabei natürlich unter den Tisch. Die Tetraederstruktur des Methans wird auf die Hybridisierung zurückgeführt mit dem Hinweis: „One electron can easily be promoted from the 2s to the 2p level“, doch die Energie für diesen Prozeß wird verschwiegen. Sind etwa 97 kcal mol^{-1} wenig, und wenn ja, bezüglich welcher Referenz? Sodann werden die Molekülorbitale des Methans falsch konstruiert und behauptet, das LUMO wäre dreifach entartet. Auf weitere Ungereimtheiten in diesem Kapitel kann hier aus Platzgründen nicht eingegangen werden. Nach der Beschreibung einiger Doppelbindungen und des VSEPR-Modells wird die Hundsche Regel so verworren formuliert, daß man sie nur noch an der Überschrift im Kasten erkennt: „Electrons occupy separate orbitals rather than being paired up“ sowie „The electrons are aligned parallel rather than antiparallel“. Wo ist da die präzise Formulierung von Hund aus dem Jahr 1927 ge-

blieben, aus der unmittelbar definitive spektroskopische Aussagen folgen? Schließlich wird gar behauptet, daß die gewinkelte Struktur des NO_2 -Radikals aus dem Jahn-Teller-Effekt resultiert.

Der zweite Teil des Buches ist mit dem erlösend wirkenden Titel „Real bonds and real compounds“ überschrieben. Wieder spielen die Metalle und Legierungen die zentrale Rolle, aber auch Wasserstoffbrücken und Donor-Acceptor-Bindungen werden beschrieben. Bei letzteren sorgte der Druckfehlerteufel für totale Verwirrung, indem er in der Schlüsselabbildung für die B–N-Bindung das Acceptororbital am Bor doppelt besetzt hat, im Gegensatz zum Text. Übergangsmetallkomplexe werden ausführlich beschrieben, aber der Jahn-Teller-Effekt muß beim Leser unverstanden bleiben, weil Konfigurationen und Zustände begrifflich nicht unterschieden werden. Ein ganzer Abschnitt über Hauptgruppenelemente kann überblättert werden, da hier längst beseitigter Urväterhausrat (d-Funktionen für Hauptgruppenelemente) erneut ausgebreitet wird. Ähnliches gilt für den Abschnitt über Aromatizität auf Hückel-Basis, der die Entwicklung der letzten zehn Jahre völlig ignoriert.

Wem kann dieses Buch empfohlen werden? Keinesfalls den Chemiestudenten, denen es der Autor gewidmet hat. Stattdessen findet der fortgeschrittene Spezialist der Festkörperchemie auf den versöhnenden letzten 50 Seiten komplexe Kristallstrukturen, keramische Stoffe, Ionenleiter, Ferroelektrika, nicht-lineare Optik, magnetische Wechselwirkungen, Supraleitung und Halbleiter.

Rudolf Janoschek [NB 1173]
Institut für Theoretische Chemie
der Universität Graz (Österreich)

Chromatographische Methoden in der Biochemie. Von H. Sternbach. Thieme, Stuttgart 1991. XII, 194 S., Broschur DM 40.00. – ISBN 3-13-752601-9

Die Isolierung großer, biologisch aktiver Moleküle (Proteine, Polysaccharide, Nucleinsäuren) ist ein wichtiger Zweig biochemischer Forschung. Die Trennung der häufig in geringster Konzentration vorkommenden Komponenten von der großen Zahl von Stoffen mit sehr ähnlichen Eigenschaften gleicht der Suche nach der Stecknadel im Heuhaufen. Sie gelingt Dank der Vielfalt chromatographischer Trenntechniken und der stetig wachsenden Zahl von Matrices; lange bekannte Trennungen werden vereinfacht, schwierige Trennprobleme können erfolgreich bearbeitet werden.

Sternbachs Taschenbuch macht den Leser mit den Grundprinzipien der chromatographischen Trennung vertraut. Nach der Beschreibung der Geräte und allgemeinen Techniken (Kapitel 1) und der Eigenschaften von Makromolekülen (Kapitel 2) wird der stets wichtigen Probenvorbereitung ein besonderer Abschnitt gewidmet. Der Aufschluß des biologischen Materials – Homogenisieren, Zentrifugieren, Fällungstechniken – wird ebenso diskutiert, wie der Einfluß von Nucleasen und Proteasen, die Effekte von Temperatur, Ionenstärke, Polarität, Oxidation etc. (Kapitel 3). Es folgen abschnittsweise die Behandlung der chromatographischen Methoden: Größenausschlußchromatographie (Kapitel 4), Chromatographie an Ionenaustauschern (Kapitel 5), Affinitätschromatographie (Kapitel 6) und schließlich in einem Abschnitt über spezielle Methoden die Behandlung der hydrophoben und der Aussalzchromatographie (Kapitel 7). Die Chromatographie unter erhöhtem Druck (HPLC) wird nicht behandelt.

Die Darstellung der Trennmethode ist praxisorientiert, die Behandlung der theoretischen Grundlagen auf das not-