

oben bereits gesagt – der Phasenraumtheorie auf Kosten der klassischen RRKM-Theorie mehr Platz einräumen können. Aber das hätte den Rahmen der vorliegenden Monographie gesprengt. So ist es bei der gut gelungenen Aktualisierung des ursprünglichen Konzeptes geblieben. Das Buch eignet sich vorzüglich als weiterführende Lektüre für fortgeschrittene Studenten und für Reaktionskinetiker, die sich mit Gasreaktionen befassen wollen.

Jürgen Troe

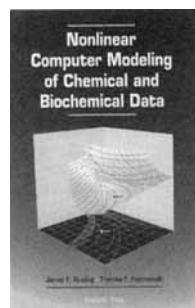
Institut für Physikalische Chemie
der Universität Göttingen

Nonlinear Computer Modeling of Chemical and Biochemical Data. Von J. F. Rusling und T. F. Kumasinski. Academic Press, San Diego, 1996. 268 S., geb. 64.95 \$. – ISBN 0-12-6044-90-2

Bedingt durch die steigende Leistungsfähigkeit moderner Rechner, gehört die digitale Speicherung von Meßdaten inzwischen zum Alltag experimenteller Praxis. Auch bei der Auswertung verläßt man sich zunehmend auf kommerziell angebotene Software. Allerdings wird man seltener fündig, wenn nichtlineare Vorgänge analysiert werden sollen. Hier bedarf es neben geeigneten Verfahren zur Modellierung komplexer Prozesse vor allem der Methoden der nichtlinearen Regression.

Chemiker haben sich mit diesen Problemen bislang nur am Rande beschäftigt. Es ist deshalb sehr zu begrüßen, daß zwei Autoren, die langjährige Erfahrungen auf dem Gebiet der Chemometrie besitzen, nun den Versuch unternommen haben, fortgeschrittene Studenten der Chemie, aber auch Praktiker in die Prinzipien der nichtlinearen Regression einzuführen und an Hand von zahlreichen Beispielen deren großen Anwendungsbereich zu dokumentieren.

Didaktisch recht geschickt werden zunächst die Grundlagen der linearen Regression vorgestellt und, darauf aufbauend, die Rechenmethoden der nichtlinearen Regression erläutert. Bei einem Gesamtumfang von 270 Seiten bleibt allerdings mit 70 Seiten für diesen ersten Teil des Buches kein Raum für Details. Auch die marginal eingebauten Pro-



grammabschnitte erlauben es dem am Computer weniger erfahrenen Leser nicht, eigene Auswertungsprogramme für experimentelle Daten zu schreiben. Dennoch sind die hier vermittelten Informationen für das Verständnis von Regressionsrechnungen sehr hilfreich und erleichtern in jedem Fall die Auswertung.

Im zweiten Teil des Bandes wird eine Fülle von experimentellen Beispielen aus dem Forschungsbereich der Autoren vorgestellt. Die Ergebnisse einschließlich der Diskussion zeigen, wie man aus gemessenen Rohdaten moderner instrumenteller Methoden zuverlässige Aussagen über Parameter von untersuchten Systemen erhält. Der Bogen spannt sich hierbei von der Spektroskopie (NMR, IR) über die Elektroanalytik bis hin zur Chromatographie und anderen analytischen Verfahren. Mit Ausnahme der elektrochemischen Untersuchungen werden zwar vorzugsweise Anwendungen auf biochemische Fragestellungen diskutiert; die meisten dieser Probleme lassen sich aber verallgemeinern, so daß sie leicht auf andere Gebiete der Chemie übertragbar sind.

Bei der Diskussion der Beispiele wird jedoch nicht immer eindeutig klar, daß der erste Schritt zur Analyse von Daten in der Modellierung des Experiments besteht. Und dies ist sehr aufwendig, wenn sich das Experiment nicht über einen analytischen Ansatz, sondern nur durch digitale Simulation beschreiben läßt. Ist die Qualität der Simulation unzureichend, kann auch die Regression keine zuverlässige Auswertung liefern.

Das Buch ermutigt dazu, sich in die komplexe Materie der Chemometrie einzuarbeiten. Es ist nützlich für alle, die Meßdaten interpretieren und sich Hintergrundwissen über Auswertungsmethoden verschaffen wollen. Die von den Autoren angesprochene Möglichkeit, selbständig Modelle und Programme zu entwickeln, ist allerdings kaum gegeben.

Jürgen Heinze

Institut für Physikalische Chemie
der Universität Freiburg

The Responsible Conduct of Research. Von D. Beach. VCH Verlagsgesellschaft, Weinheim, 1996. 162 S., Broschur 48.00 DM. – ISBN 3-527-29333-7

Wäre es nicht sinnvoll – um des wissenschaftlichen Fortschrittes willen –, beispielsweise die Atomkoordinaten einer so eben aufgeklärten Proteinstruktur in eine Datenbank einzugeben, um sie auch anderen Forschern zugänglich zu machen?

Oder sollte man nicht besser darauf verzichten, seinen Artikel über die Synthese eines lange gesuchten Zielmoleküls noch rasch in einer Zeitschrift mit kurzen Publikationszeiten veröffentlichen, nachdem man vom Gutachter eines „langsameren“ Journals erfuhrt, daß eine andere Gruppe dieses Synthesenziele ebenfalls vor kurzem erreicht hat? Es gibt solche unmoralischen – aber nicht illegalen – Handlungsweisen. Sie sind selten (noch seltener ist wirklicher Betrug), aber es gibt sie. Interessant ist die Hybris, die sich hinter meiner Frage „Wäre es nicht sinnvoll?“ verbirgt, denn damit setze ich voraus, daß Ethik logisch ist.

Ethik ist nicht logisch, und Wissenschaftler ist Moral nicht angeboren (im übrigen auch nicht Logik). Die Wissenschaft ist eine außerordentlich erfolgreiche soziale Struktur mit der Aufgabe, Zusammenhänge zu erforschen. Ihre Akteure sind neugierige, intelligente, aber nicht unfehlbare Menschen, die alle Hilfe brauchen, die sie bekommen können, um moralisches Verhalten zu erlernen – von ihren Eltern, Freunden, religiösen Ratgebern, Lehrern, und auch aus Büchern. Zusätzlich müssen sie miteinander reden; nicht so sehr über allgemeine moralische Prinzipien, sondern über spezifische Einzelheiten, oft auch Unerfreuliches. Schwierige ethische Probleme führen häufig zur Kollision der Wertvorstellungen beteiligter Personen. So wird die Moral unvermeidlich durch das Gespräch mit anderen geprägt.

Enthüllungen der Presse und das Interesse von Regierungen an spektakulären Fehlitten der Wissenschaft (die meisten Forscher finden beides übertrieben, wenn nicht gar boshaft) haben endlich zu einigen argumentativ sorgfältig ausgearbeiteten Abhandlungen über Ethik und Verantwortung in der Wissenschaft geführt. Uns liegen mittlerweile auch Arbeiten über die Aufgabe von Regierungen (in manchen Bereichen) zur Erstellung von strukturierten Anleitungen sowie das eine oder andere Buch für Wissenschaftler vor.

Das Buch von Doré Beach und Coautoren spricht in der Tat die meisten wichtigen Fragen der Ethik in der wissenschaftlichen Forschung an. Die Art und Weise, wie das geschieht, finde ich allerdings zum Teil unbefriedigend; bevor ich aber näher darauf eingehe, lassen Sie mich kurz etwas zum Inhalt dieses Buches sagen. Es enthält zehn angemessen kurze Kapitel. Die Themen reichen von einer Definition des Begriffes „Ethik“ und einem kurzen Abriß des Stellenwertes der Ethik in der Philosophie über ethische Fragen des Publizierens und der gesetzlichen Grundlage zum Schutze geistigen Eigentums bis hin

zu einer Diskussion von Fällen des Fehlverhaltens. In Anbetracht der knappen, gut lesbaren Form ist diese Zusammenstellung umfassend – ernsthaft vermißt habe ich lediglich eine Erörterung der umstrittenen, aber weitgehend ethisch begründeten Problematik von Tierschutz und Tierversuchen. Fünf der zehn Kapitel stammen von D. Beach (Director of Responsible Conduct of Research and Applied Ethics an der Universität von Süd-Florida), die übrigen fünf haben Kollegen von ihr geschrieben, meist aus der Verwaltung oder der „Division of Sponsored Research“ (das sind die Leute, die uns helfen unsere Forschungsanträge zu bearbeiten). Verständlicherweise ist das Buch demzufolge sehr auf amerikanische Verhältnisse ausgerichtet. Jedes Kapitel schließt mit einer oder mehreren Fallstudien – ausführlich dargestellt, realistisch und oft faszinierend –, die stets von einigen Fragen begleitet werden, die eine mögliche Diskussion leiten könnten.

Das Buch richtet sich an aktive Wissenschaftler, vielleicht eher an Akademiker als an industriell tätige Forscher. Amüsannt fand ich, daß zwar ein Glossar philosophischer Begriffe beigelegt wurde, welches unter anderem Termini wie „Pflicht“ und „Wahrheit“ enthält, daß man aber vergeblich nach Erklärungen von Fachbegriffen aus dem Patentrecht sucht.

Ein wirklicher Vorzug des Buches ist der moderate Tonfall: Animierte doch das Thema regelrecht zum Polemisieren, zur Verteidigung oder zum moralisierenden Heben des Zeigefingers (wozu ich gewöhnlich neige, wenn ich über Ethik schreibe). Wenn ein Buch von mehreren Autoren verfaßt wurde, sind stilistische Unausgeglichenheiten durchaus verständlich – obwohl der Text offensichtlich überarbeitet wurde, um die Form zu vereinheitlichen (wie die konsistente Gestaltung der Fallstudien vermuten läßt). Warum bin ich also dennoch zum Teil unzufrieden?

Zunächst ein schlechter Beginn! Ein Buch, das unter anderem ethische Probleme der Autorenschaft diskutiert, sollte uns nicht im Unklaren darüber lassen, wer seine Autoren sind. Die Hälfte des Buches

hat D. Beach verfaßt, die andere Hälfte ihre Kollegen. Deren Namen tauchen zwar im Inhaltsverzeichnis auf, aber nicht auf dem Umschlag oder auf der Titelseite. Dafür hätte es sicher eine bessere Lösung gegeben.

Beachs eigener Stil ist nicht ausgewogen. Stellenweise schreibt sie autoritär, beispielsweise in der Diskussion über Ethik in der Philosophie oder in dem wichtigen Abschnitt über den „Nürnberger Codex“ zu Experimenten an Menschen. Es ist gut, daran erinnert zu werden, daß die Grundgedanken, Humanexperimente nur auf der Basis der Zustimmung des informierten Individuums sowie einer sorgfältigen Risiko-Nutzen-Analyse vorzunehmen, auf diesen Codex von 1946 zurückgehen und daß die USA es zwanzig Jahre lang versäumt haben, amerikanischen Wissenschaftlern dieser Deklaration entsprechende Richtlinien vorzugeben. Stellenweise verfällt die Autorin jedoch in ein rein chronologisches Aufzählen von Fakten wobei als Quelle oft der – durchaus angemessen zitierte – Bericht einer US-Agentur dient. Die bedeutend größere Herausforderung, die in dieser Quelle enthaltenen Widersprüche herauszustellen und zu kritisieren – seien dies ethische Praktiken der Datenverwaltung oder Sicherheitsbelange in der Chemie – nimmt sie allerdings nicht an.

Beach behauptet (und darin stimme ich mit ihr überein), daß moralisches Verhalten durch Kasuistik – die Analyse von Einzelfällen – geformt wird, d.h. durch einen offenen Dialog beteiligter oder betroffener Personen zu einem bestimmten Thema; ich würde dies auch „Situationsethik“ nennen. Dies rechtfertigt den Platz, den die Autoren den Fallstudien einräumen (einschließlich den „Fragen zur Diskussion“). Wonach ich mich allerdings nach einer Weile regelrecht zu sehnen begann, war die explizite Diskussion eines solchen Beispiels. Diese könnte natürlich keine für alle Ewigkeit gültige Entscheidung oder Antwort liefern, aber man würde zumindest einen Einblick in die Argumente (logisch oder nicht) der verschiedenen Seiten erhalten. Die wirklich interessanten (problematischen) Fragen der

Ethik sind doch solche, die uns in Konflikt mit allgemein akzeptierten Wertvorstellungen bringen, wie beispielsweise das Verbot von Thalidomid (Contergan) trotz der Behandlungserfolge bei Lepra und vielleicht sogar bei AIDS. Ich hätte gerne gelesen, welche Argumente intelligente, aber leidenschaftlich engagierte Menschen in solchen Fällen vorbringen. Mich hätte sehr interessiert, wie jemand, der in Ethik geschult ist, nicht das Problem lösen, aber zumindest die Diskussion in produktive Bahnen lenken könnte.

Ansätze hierzu waren sicherlich im Text zu finden, wie beispielsweise in Beachs Diskussion der von David Keen entwickelten Geschosse, die kugelsichere Westen durchlöchern und Fleisch zerfetzen können. Einiges hierzu fand ich in dem am besten geschriebenen Kapitel des Buches (von Lawrence R. Oremland) über das Recht am geistigen Eigentum. Oremland dringt tief in seine Fallbeispiele ein – so wie ich es eigentlich erwartet habe. Und nach dem Lesen seiner Darstellung des „Texaco-Falles“ wird man es sich zweimal überlegen, ob man z.B. einfach acht Artikel aus dem *Journal of Catalysis* für die eigenen Unterlagen kopiert.

In gewisser Weise ist die Ethik wie die Wissenschaft – ungleich der Justiz oder Politik. Legt man der Wissenschaft eine schwierige (und demzufolge interessante) Frage mit scheinbar widersprüchlichen Argumenten vor, kann sie sagen: „Ich weiß noch nicht genau was richtig ist. Frag' mich nächstes Jahr nochmal.“ Ein ethischer Diskurs führt zu einer unausweichlichen Auseinandersetzung mit den berechtigten Argumenten der anderen Seite, d.h. mit den moralischen Ansprüchen der verschiedenen Positionen. Die Justiz dagegen kann es sich nicht leisten, ängstlich Alternativen aufzuzählen oder abzuwarten. Sie muß entscheiden, „schuldig“ oder „nicht schuldig“. Und Politiker müssen fortwährend Kompromisse zwischen unvereinbaren Interessen schließen, Kompromisse, die wir – Sie und ich – verabscheuen. Meinen Respekt den Richtern und Politikern.

*Roald Hoffmann
Ithaca, NY (USA)*