

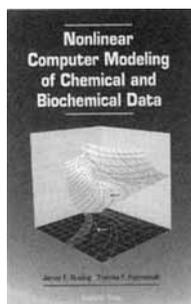
oben bereits gesagt – der Phasenraumtheorie auf Kosten der klassischen RRKM-Theorie mehr Platz einräumen können. Aber das hätte den Rahmen der vorliegenden Monographie gesprengt. So ist es bei der gut gelungenen Aktualisierung des ursprünglichen Konzeptes geblieben. Das Buch eignet sich vorzüglich als 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. Kumosinski*. 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 Experimentes 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 soeben 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 erfuhr, daß eine andere Gruppe dieses Synthesziel 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 Wissenschaftlern 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 Fehlritten 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