

gegen jegliche Konvention völlig verwirrend dargestellt und Mechanismen organisch-chemischer Reaktionen so entstellt, daß selbst der geübte Synthetiker Probleme hat, den Zusammenhang zwischen Edukten und Produkten zu entschlüsseln. An dieser Stelle drängen sich Zweifel auf, ob das zugrunde liegende Manuskript jemals redigiert wurde. Nicht selten findet man nämlich hypervalente Atomzentren in den Strukturformeln, so sind fünf-bindeg Kohlenstoffatome oder vierbindige Stickstoffatome (neutral) keine Seltenheit. Zudem sind im Inhaltsverzeichnis anstelle von Seitenzahlen hin und wieder Fragezeichen abgedruckt. Die gesamte graphische Aufarbeitung der chemischen Inhalte erinnert eher an ein oberflächlich erstelltes Vorlesungsmanuskript und weniger an ein zeitgemäßes Lehrbuch, und der Leser wird sich darüber wundern, daß das Buch in der vorliegenden Ausgabe überhaupt den Markt erreicht hat.

Vor dem Angebot der im Fachhandel erhältlichen deutschsprachigen Lehrbücher der Medizinischen Chemie, hier seien stellvertretend die Monographien von R. B. Silverman, oder von H.-J. Böhm, G. Klebe, H. Kubinyi genannt, kann die vorliegende Ausgabe des Buches weder dem Studierenden, noch dem praktizierenden Chemiker empfohlen werden. Überhaupt macht das Werk weniger den Eindruck eines an den Studierenden adressierten Lehrbuchs, es eignet sich allenfalls als Nachschlagewerk für den gelegentlich an medizinisch-chemischen Fragestellungen interessierten Wissenschaftler. Abschließend sei die Bemerkung erlaubt, daß Alex Gringauzs „Introduction to Medicinal Chemistry“ angesichts der Konkurrenz wirklich moderner Lehrbücher auf dem deutschen Markt wenig Freunde finden wird.

*Gerhard Müller  
BAYER AG  
Leverkusen*

**Data Analysis for Chemists.** Von D. Livingstone. Oxford University Press, Oxford, 1996. 239 S., Broschur 40 £.— ISBN 0-19-855728-0

Bei diesem Buch handelt es sich nicht um ein Lehrbuch oder eine umfassende theoretische Abhandlung über statistische Verfahren, sondern um ein praxisbegleitendes ingenios komprimiertes Sachwerk, das kurz und prägnant Auskunft gibt zu Experimentplanung, Datenvorbereitung und -analyse, Auswertungsmethoden, Konstruktion und Interpretation quantitativer Modelle sowie Dokumentation von Ergebnissen. Die übersichtliche Gli-

derung des Buches in neun Kapitel, die nach logischer Abfolge geordnet und in sich abgeschlossen sind, verschafft dem Leser einen verständlichen Rahmen und erleichtert die Zuordnung verschiedenster Methoden zu einem Überbegriff. Gleiches gilt für den tabellarischen Anhang mit der für die Datenanalyse verfügbaren Software.

Im ersten Kapitel werden häufig verwendete Deskriptoren für molekulare und physikochemische Eigenschaften durch in den Text eingefügte Schriftkästen vorgestellt.

Kapitel zwei behandelt ein wichtiges Feld, das oft nicht genügend Beachtung findet: experimentelles Design, Verbindungs- und Parameterauswahl. Hier werden unterschiedliche Techniken, wie das „single factor design“, „fractional factorial design“ oder „D optimal design“ vorgestellt und Strategien zur Auswahl von Verbindungen offeriert.

Im folgenden Kapitel werden Vorbereitungsverfahren zu einer Datenanalyse wie Skalierung und Reduktion von Daten beschrieben.

Das vierte Kapitel behandelt die Visualisierung höherdimensionaler Daten. Neben den klassischen linearen Methoden zur Dimensionsreduktion werden auch neuere, nichtlineare Verfahren diskutiert.

Die nachfolgenden Kapitel beschreiben die unterschiedlichen Möglichkeiten der Datenanalyse. Zunächst werden die Methoden des „unsupervised learnings“ vorgestellt, die rein auf der Verteilung der Eigenschaftsparameter beruhen und keine Bezugsgröße wie biologische Aktivität etc. erfordern. Die Klassifizierung von Objekten im multidimensionalen Raum durch Clustering-Methoden wird diskutiert, wobei die Problematik dieser Verfahren dem Leser anhand verschiedener Datensätze anschaulich aufgezeigt wird. Weiterhin werden die Faktorenanalyse und die Hauptkomponentenanalyse gegenübergestellt. Etwas detaillierter wird auf die klassische Regressionsanalyse (einfache, multiple und nichtlineare) eingegangen und das Problem von Zufallskorrelationen beschrieben.

In Kapitel sieben werden neben der Diskriminanzanalyse ebenfalls mit latenten Variablen arbeitende Verfahren wie SIMCA, PCR und PLS behandelt, wobei auch auf die Schwierigkeit der Interpretation der latenten Variablen eingegangen wird. Die Auswertung von Datensätzen mit multiplen biologischen Aktivitäten wird dem Leser in Kapitel acht nähergebracht.

Im abschließenden Kapitel werden Verfahren der künstlichen Intelligenz zur Da-

tenanalyse besprochen. Hier wird die Anwendung von Expertensystemen für die Berechnung von Verteilungskoeffizienten, für Toxizitätsvorhersagen und für das Verfolgen von chemischen Reaktionswegen in geraffster aber dennoch verständlicher Form beschrieben. Auch in die Arbeitsweise künstlicher neuronaler Netze wird ein Einblick gegeben.

Zusammenfassend ist zu sagen, daß dieses Buch insbesondere für den Nicht-Fachmann sehr hilfreich ist, da es die verschiedenen Analysenmethoden vorstellt sowie ihre Vor- und Nachteile diskutiert.

*Romy Fleischer*

Institut für Pharmazeutische Chemie  
der Martin-Luther-Universität  
Halle/Saale

**Medicinal Chemistry: Today and Tomorrow.** Herausgegeben von M. Yamazaki. Blackwell Science, Oxford, 1996. 278 S., geb. 49.50 £.— ISBN 0-632-04272-9

Das vorliegende Buch faßt in insgesamt 41 – thematisch leider nicht geordneten – Beiträgen, die jeweils einen Umfang von 4–6 Seiten haben, die Vorträge zusammen, die anlässlich des von der Pharmaceutical Society of Japan im September 1995 in Tokio ausgerichteten Symposiums „AFMC International Medicinal Chemistry Symposium“ (AIMECS 95) von Wissenschaftlern aus Industrie und akademischen Forschungseinrichtungen gehalten wurden.

In diesen Kurzreferaten kommen nahezu alle allgemeinen Aspekte der modernen medizinisch-chemischen Forschung anhand ausgewählter Beispiele zur Sprache. Die Isolierung und Charakterisierung biologisch aktiver Naturstoffe aus unterschiedlichsten Quellen wie marinen Organismen und tropischen Pflanzen, mikrobiellen Metaboliten und bioaktiven Bestandteilen sowie die in der klassischen chinesischen Medizin angewendeten Heilmittel werden vorgestellt. Diese Beiträge stellen zum Teil auch Synthesen der Naturstoffe und deren Analoga vor und leiten zu Referaten über, die die Herstellung von biologisch relevanten Naturstoffen wie Inositolphosphaten, Brevetoxin und Oligosacchariden zum Thema haben, aber auch allgemeine Methoden behandeln, wie die Entwicklung enantioselektiver Reaktionen. Deren Umsetzung im industriellen Umfeld durch klassisch-chemische oder biokatalysierte Verfahren wird vor dem Hintergrund bestimmter Indikationen und Targets, wie AIDS, Diabetes, Glutamat-, Opiat-, Angiotensin II-, Prostanoid-, Endothelin- und Kainat-

Rezeptoren sowie Renin- und DNA-Gyrase-Inhibitoren und NOx deutlich. Ergänzt werden diese Kapitel durch Abschnitte über kombinatorische Synthese und molekulare Diversität, Wirkstoff-Design und -Metabolismus, polymergebundene Wirkstoffe, „Drug-Delivery“-Systeme sowie neue Strategien zur Erhöhung der Membranpermeabilität von Peptiden.

In einem weiteren Block von Vorträgen kommen biologische Vorgänge und Proteine zur Sprache, die Ansatzpunkte für die Entwicklung neuer oder verbesserter Therapien bieten können – beispielsweise die Cytokin- und Integrin-Rezeptoren, die Apoptose, die Regelung der Genexpression, die Rolle von Sphingoglycolipiden bei der Signaltransduktion und die Modulierung der Kohlenhydrate bei der Expression rekombinanter Glycoprotein-Therapeutika. Auch den Behörden wurde ein Forum geboten: Je ein(e) Vertreter(in) der Europäischen Kommission, der FDA und des Japanischen Gesundheitsministeriums legen Grundsätze für die Entwicklung sogenannter „Ophan Drugs“ vor – Wirkstoffe zur Behandlung von Krankheiten, die nur bei einer relativ kleinen Zahl von Patienten auftreten und deren Entwicklung daher oftmals an ökonomischen Erwägungen scheitert.

Der Tagungsband ist durch die recht große Zahl der unterschiedlichen Beiträge sehr facettenreich und interessant. Die Organisatoren der Tagung haben bei der gelungenen Auswahl der Themen und der Vortragenden bewiesen, daß sie auf der Höhe der Zeit und der aktuell intensiv betriebenen Forschung sind. Obwohl viele Aspekte der modernen medizinischen Chemie angesprochen werden, fehlen meines Erachtens einige Gebiete leider völlig, etwa die Tumorsuppressoren, die Kinase-Inhibitoren oder die Inhibition von Protein-Protein-Wechselwirkungen über SH2- und SH3-Domänen. Dies ist jedoch nicht nachteilig. Jede Tagung in einem rasch wachsenden Forschungsgebiet kann immer nur einen Schnappschuß des momentanen Kenntnis- und Entwicklungstandes geben. Entsprechende zukünftige Momentaufnahmen werden naturgemäß andere Schwerpunkte setzen. Dem Charakter als Tagungsband entsprechend ist das vorliegende Buch eher für Fachleute von Interesse als für interessierte, aber mit der Materie nicht vertraute Laien. Besonders Chemikern aus der medizinischen Chemie, die sich über Neuigkeiten in ihrem Gebiet informieren wollen, aber auch Naturstoffchemikern und Synthesechemikern sowie Biologen, die an der möglichen Relevanz ihrer Arbeit für die medizinische Chemie interessiert sind oder auch Vorlesungen und Vorträge um fächerübergre-

fende Facetten bereichern wollen, bietet das vorliegende Buch eine interessante Lektüre.

Herbert Waldmann  
Institut für Organische Chemie  
der Universität Karlsruhe

**Kleines chemisches Praktikum.** Von *E. Dane, F. Wille und H. Laatsch*. WILEY-VCH, Weinheim. 1997. 308 S., Broschur 42.00 DM.—ISBN 3-527-29440-6

Endlich ist er da, der *moderne* Dane-Wille. Als ein Praktikumsbuch der Chemie für Anorganische Chemie **und** Organische Chemie hatte der Dane-Wille viele Liebhaber gefunden und unzählige Studenten mit den Grundbegriffen und wesentlichen Reaktionen der Chemie vertraut gemacht. Gerade wegen seiner weiten Verbreitung war es nun hoch an der Zeit, dieses Buch zu „modernisieren“, und z. B. die Kapitel über den Atombau und die chemische Bindung oder über die Chromatographie auf den neuesten Stand zu bringen, sowie Hinweise zur Arbeitssicherheit und Gefahrstoff-Verordnung, zu Sicherheitsvorschriften und zum Umweltschutz aufzunehmen.

Die ersten drei Kapitel beschäftigen sich mit dem Periodensystem, dem Atombau, der Chemischen Bindung und der Gefahrstoffverordnung. Daran schließen sich die 17 Kapitel aus der Anorganischen Chemie sowie die 16 Kapitel aus dem Bereich der Organischen Chemie an. Außer der Chemie der Elemente werden auch Themen wie Elektrolyte, Oxidation und Reduktion, chemische und physikalische Gleichgewichte, Säuren und Basen, Komplexe sowie Kolloide in eigenen Kapiteln besprochen. Den Abschluß des Anorganischen Teils bilden 2 Kapitel über die qualitative und quantitative Analyse.

Im organischen Teil findet man neben der Chemie der verschiedenen Substanzklassen Kapitel über Substitutionsreaktionen an Aromaten, Orbitale in C-, O- und N-Verbindungen, Chromatographie und Reaktionskinetik. Auch die qualitative Analyse organischer Verbindungen wird in einem eigenen Abschnitt behandelt. Alle Kapitel sind mit gut ausgesuchten und genau beschriebenen Versuchen ausgestattet, die es jedem Interessierten ermöglichen, mit Begeisterung zu experimentieren und sich die Grundlagen der Chemie anzueignen. Auch der Anhang mit einer allgemeinen Laboratoriumsordnung, den R- und S-Sätzen, MAK-Werten oder der eluotropen Reihe verschiedener Lösungsmittel für die Chromatographie ist von großem Wert.

Ich glaube, daß man bei einer Neuauflage den vereinzelt angebrachten Hinweis „Schutzbrille!“ weglassen sollte, da der unerfahrene Experimentator sonst zu der Meinung gelangt, bei den anderen Versuchen sei keine Schutzbrille notwendig. Es ist auch zu fragen, ob es sinnvoll ist, bei den Haupt- oder Nebengruppen nur die Elemente zu erwähnen, für die Versuche angeboten werden. Der Hinweis, daß bei organischen Teilchen eine Ladung mit einem Kreis versehen wird, wird nur sporadisch umgesetzt und unter Polyaddition sollte man die Polyurethane behandeln, die Polymerisation sollte in einem eigenen Abschnitt diskutiert werden. Insgesamt ist das Buch ein sehr gelungenes Werk, zu dem man Autor und Verlag gratulieren kann und dem man eine weite Verbreitung wünschen und voraussagen kann.

Hans Neunhoeffer  
Institut für Organische Chemie  
der Technischen Hochschule Darmstadt

**Exercises in Synthetic Organic Chemistry.** Herausgegeben von *C. Ghiron und R. J. Thomas*. Oxford University Press, Oxford 1997. 139 S., geb. 40.00 £.—ISBN 0-19-855944-5

Die Autoren haben 82 Total- und Partialsynthesen neueren Datums ausgewählt und stellen diese im vorliegenden Buch in der Art eines – aus didaktischen Gründen – lückenhaften Syntheseschemas vor. Von bekannten Edukten ausgehend soll der Leser die Reagentien und Reaktionsbedingungen vorschlagen, mit denen ein Produkt hergestellt werden kann, oder es werden umgekehrt die Reagentien vorgegeben und der Leser soll das Reaktionsprodukt herausfinden. Als weitere Anregungen findet man zu jeder Synthese Vorschläge für Diskussionspunkte sowie aktuelle Übersichtsartikel zu den Schlüsselschritten. In einem Punkt allerdings sind die Autoren inkonsistent: Sie schätzen im Vorwort die Retrosynthese als besonders wertvolles Instrument der Synthesespaltung ein und belassen es dabei. Eine den Erläuterungen zur Synthese vorangestellte Retrosyntheseanalyse wäre in einem derartigen Übungsbuch sicherlich geeignet, dem Leser zunächst einen Überblick über die bevorstehende Aufgabe zu vermitteln.

Ein Stichwortverzeichnis fehlt leider – es würde dem Leser das gezielte Suchen erleichtern. Die gut ausgewählten Literaturstellen könnte man mit einem Index sehr einfach nutzen, um sich einen schnellen Überblick über eine Vielzahl neuerer Synthesemethoden zu verschaffen.

Die Auswahl der Aufgaben ist sehr ansprechend, häufig beinhaltet die Synthe-