

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. Gleichesmaßen hilfreich ist der tabellarische 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-