

und von zahlreichen anderen Theoretikern verfeinert wurden. Memming geht in Kapitel 6 auf diese Theorien näher ein, wobei es unvermeidlich zu Vereinfachungen kommt. Der interessierte Leser sollte dieses Kapitel nur als Einstieg in die Theorie des Elektronenübergangs sehen und sollte nicht zögern, verstärkt die Originalliteratur zum weiteren Studium heranzuziehen. Außerdem wäre es von Vorteil, wenn ein Wissenschaftler, dessen Spezialgebiet Elektronentransferprozesse sind, das Kapitel redigieren und nebenbei die Druckfehler in den Gleichungen korrigieren würde. Leider kommen auch in anderen Kapiteln Druckfehler in Gleichungen und Nachlässigkeiten beim Zitieren vor.

In Kapitel 7 wird ein Überblick über die Grundlagenforschung zu einstufigen Elektronenübergängen zwischen einem Halbleiter und einem Redoxsystem gegeben. Prozesse, die ohne und mit Bestrahlung ablaufen, werden vorgestellt. Komplexere Ladungstransferprozesse, die zu einer Auflösung des Halbleitermaterials führen, werden in Kapitel 8 diskutiert. Dieses Kapitel ist ebenfalls sehr kompakt, sodass Leser, die sich genauer über solche Prozesse informieren möchten, auf die Originalliteratur zurückgreifen müssen, z. B. über elektrochemische Oberflächenbehandlungen. Eine ausführlichere Liste mit Originalarbeiten wäre in diesem Zusammenhang wünschenswert.

Das Kapitel 9 gibt einen Einblick in die photoelektrochemischen Reaktionen mit Halbleiterpartikeln, deren Größe im Nanometerbereich liegt und bei denen Größen-Quantisierungseffekte auftreten können. Die folgenden Kapitel befassen sich mit dem photoinduzierten Elektronenübergang zwischen Farbstoffmolekülen und Halbleitern. Im letzten Kapitel werden mögliche Anwendungen von Halbleiter-Photoelektroden erörtert.

Wem nützt dieses Buch? Für Neueinsteiger in das Gebiet ist es ein nützliches Werkzeug bei der Koordination von Informationen aus allgemeinen Lehrbüchern der Elektrochemie und der Physikalischen Chemie sowie der Originalliteratur. Erfahrene Forscher finden eine umfassende Zusammenstellung der Theorien und experimentellen Ergebnisse aus vielen Teilbereichen der Halbleiter-Elektrochemie. *Semiconductor*

*Electrochemistry* vermittelt sowohl die Grundlagen als auch aktuelle Forschungsergebnisse; der Stoff wird ausführlicher behandelt als in vorhergehenden Büchern zu diesem Thema. Auch neue Entwicklungen wie größenquantisierte photoelektrochemische Systeme und poröse Farbstoff-sensibilisierte photoelektrochemische Solarzellen werden vorgestellt.

Daniël Vanmaekelbergh  
Universität Utrecht (Niederlande)

**Lubricants and Lubrication.** Herausgegeben von *Theo Mang* und *Wilfried Dresel*. Wiley-VCH, Weinheim 2001. XXXIX + 759 S., geb. 328.00 DM (ca. 167 €).—ISBN 3-527-29536-4

Die Verminderung von Reibungsver-schleiß durch Schmierstoffe ist ein wichtiges und aktuelles Thema. Die Forderungen nach Energieeinsparung, Schutz der Rohstoffquellen und Emissionsreduzierung verlangen die Entwicklung neuer und die Verbesserung vorhandener Schmierstoffe, einschließlich synthetischer Grundöle, Additive und neuer Materialkombinationen. Zudem müssen neue tribologische Systeme konzipiert werden für Bereiche wie die Raumfahrt, die Halbleitertechnologie, wofür Ultra-reinstbedingungen erforderlich sind, oder die Miniaturisierung von Reibungspaa-ren, wo extreme spezifische Belastungen auftreten. Die bisher erschienenen Monographien beleuchten dieses zentrale Thema unter verschiedenen Gesichtspunkten, z. B. unter chemischen (die Herstellung von Grundölen und Additiven und ihre Eigenschaften), physikochemischen (Grenzschmierung), physikalischen (Reibung und Verschleiß) und technischen Aspekten (Tribologie als Systemeigenschaft).

Das vorliegende Buch vermittelt dem Leser einen aktuellen Überblick über die derzeitige Entwicklung und Verwendung von Schmierstoffen vermitteln. Neunzehn von siebzehn Autoren verfasste Kapitel wurden aufgenommen, die den gesamten Themenbereich „Reibung/Schmierstoff“ abdecken. Gemäß dem Zweck des Buches steht die Vielfalt von mineralischen und synthetischen

Grundölen und Schmierstoffadditiven und ihr Einsatz als Schmiermittel für Verbrennungsmotoren (33 Seiten), als Getriebeöle (39 Seiten), Hydrauliköle (55 Seiten), Verdichteröle (29 Seiten), Turbinenöle (16 Seiten), Arbeitsmedium bei der Metallverarbeitung (135 Seiten), Schmiermittel bei der Verformung (18 Seiten), Schmierfette (43 Seiten) und Festschmierstoffe (21 Seiten) im Mittelpunkt.

Weitere Kapitel beschäftigen sich mit Schmierstoffen in der Umwelt (50 Seiten) und der Beseitigung gebrauchter Schmieröle. Der Leser wird über die grundlegenden Gesetze und Richtlinien für die Verwendung von umweltschädigenden Komponenten („eco-labels“) verschiedener Länder informiert. Dies beinhaltet Transportregelungen und -bedingungen zur Verhinderung von Wasser- und Luftverschmutzung, Vorschriften beim Umgang mit Öl und die zugrundeliegenden nationalen und ISO-Normen.

Das 23 Seiten umfassende Inhaltsverzeichnis ist sehr ausführlich und erleichtert dem Leser das Auffinden bestimmter Themen außerordentlich. Im Gegensatz dazu ist das 10-seitige Stichwortverzeichnis sehr dürftig und der Stofffülle nicht angemessen.

Auf die Problematik der Schmierung neuer Reibungssysteme, die z. B. aus keramischen Werkstoffen bestehen, wurde leider nicht eingegangen. Zwar spielen diese Systeme in der Technik gegenüber den Systemen mit metallischen Reibungspartnern nur eine untergeordnete Rolle, aber ein Kapitel hätte man diesen keramischen Materialien schon widmen können. Die wichtigsten Anwendungen von Schmiermitteln werden in einer umfassenden Einleitung zusammengefasst. Die Autoren sind international anerkannte Experten vornehmlich aus der Industrie. Deshalb wird das Thema „Reibung/Schmierstoff“ schwerpunktmäßig unter dem Aspekt der Anwendung behandelt und die Beschreibung mechanistischer Effekte, insbesondere der Wirkung von Additiven auf Reibung und Verschleiß, tritt in den Hintergrund. Neuere Ergebnisse von Untersuchungen der Wirkmechanismen verschiedener Antioxidantien werden ebenso wenig beschrieben wie Modellsubstanzen von Grundölen und Additiven, die dem interessierten Forscher

tieferen Einsichten in den Wirkmechanismus gewähren würden. Dies ist meines Erachtens ein Schwachpunkt des Buches, zumal gerade in den letzten Jahren mit Hilfe spektroskopischer Methoden wichtige Erkenntnisse über die Funktion verschiedener Klassen von Additiven gewonnen wurden.

Labortechnikern, die Schmiermittel kontrollieren und bewerten müssen, dem Wartungspersonal eines Betriebs, das Schmierstoffe in der Prozesstechnik einsetzt, Fachleuten in Forschung und Entwicklung, die sich mit dem Problem Reibung und Abrieb beschäftigen, Ingenieuren, die Schmierstoffe als Funktionselement und als Mittel sehen, das die Nutzungsdauer und die Sicherheit von Maschinen erhöht und Umweltschutzbeauftragten, die für die Sicherheit am Arbeitsplatz, eine akzeptable Verwendung von Rohstoffquellen und die Verminderung und Vermeidung von Emissionen und Abfällen verantwortlich sind, all jenen bietet das vorliegende Buch einen schnellen Einstieg in das Thema.

Klaus Meyer

Bundesanstalt für Materialforschung  
und -prüfung (BAM)  
Fachgruppe Anorganische Analytik  
Berlin

**Protein Structure Prediction.** *Methods and Protocols* (Methods in Molecular Biology, Vol. 143). Herausgegeben von David M. Webster. Humana Press, Totowa 2000. 422 S., geb. 89.50 \$.—ISBN 0-89603-637-5

Die Flut von Genomsequenzen, die in Genbanken gespeichert sind, stellt nur dann eine verständliche biologische Information dar, wenn bestimmte Genomsequenzen eindeutig Struktur und Funktion eines Proteins (und möglicherweise auch einer RNA) zugeordnet werden können. Das vorliegende Buch ist dem entscheidenden Punkt bei der Lösung dieses biologischen Rätsels gewidmet: der Aufklärung (und nicht unbedingt dem Verständnis) des Zusammenhangs zwischen Proteinsequenz und -struktur. Zur Zeit enthält die SWISSPROT-TrEMBL-Datenbank über 560 000 Proteinsequenzen. Demgegenüber sind nur 7050 Proteinstrukturen (mit einer maxi-

malen Sequenzübereinstimmung von 95 %) in der Protein Data Bank (PDB) zu finden. Die erfolgreiche Sequenzierung der Genome einer Reihe von Organismen, darunter auch die im Juni 2000 bekanntgegebene Arbeitsversion der Genomsequenz des Menschen, und weitere Erfolge bei der Sequenzbestimmung werden dazu führen, dass die Lücke zwischen der Anzahl der bekannten Proteinsequenzen und der Anzahl der ermittelten Proteinstrukturen immer größer wird. Da auf dem Gebiet der experimentellen Strukturbestimmung augenblicklich mit einer bahnbrechenden Entdeckung nicht zu rechnen ist, hofft man, mit theoretischen Methoden diese Lücke schließen zu können.

Protein Structure Prediction umfasst 18 Kapitel, in denen namhafte Experten über die wesentlichen Aspekte der computergestützten Berechnung von Proteinstrukturen berichten. Das Buch ist gemäß dem üblichen Prozessablauf bei der Strukturermittlung gegliedert: Der Sequenzanalyse folgt zunächst die Bestimmung der Sekundär- und Tertiärstruktur und anschließend die Untersuchung des molekularen Andockens. In Kapitel 1 geben D. G. Higgins und W. R. Taylor eine detaillierte Einführung in die von ihnen entwickelten Programme zur gleichzeitigen Ausrichtung mehrerer Sequenzen zueinander. Leider basieren beide Programme auf dem gleichen generellen Algorithmus, einer progressiven globalen Ausrichtung; andere Algorithmen werden nicht besprochen, so dass der Nutzen dieses Kapitels beschränkt ist. Taylor verfasste auch das folgende Kapitel über Proteinstrukturbestimmung, in dem er in groben Umrissen verschiedene Methoden beschreibt und seinen eigenen Algorithmus sowie sein Programm vorstellt. In Kapitel 3 berichtet I. Jonassen über die Sequenzmustererkennung. Er geht besonders auf die Mustererkennung in nicht ausgerichteten Proteinsequenzen ein, gibt einen Überblick über verschiedene Algorithmen und bespricht sein Programm etwas ausführlicher. C. P. Ponting und E. Birney befassen sich in ihrem Beitrag mit der Identifizierung von Strukturdomänen anhand der Analyse der Proteinsequenz. Sie stellen ein Verfahren vor, das eine Kombination von Programmen verschiedener Autoren darstellt. Das folgende Kapitel über

die Vorhersage von Sekundärstrukturen stammt von B. Rost und C. Sander. Ihr ausgezeichnete Übersichtsartikel enthält praktische Erörterungen und eine umfassenden Liste von Literaturzitationen. Selbstverständlich gehen sie auch auf das von ihnen entwickelte Programm zur Sekundärstrukturvorhersage ein. Mit Kapitel 6 wird das Gebiet der Proteinstrukturvorhersage betreten, in dem Themen wie vergleichende Modellierung, Proteinfaltung und Ab-initio-Methoden zur Vorhersage von Proteinstrukturen von großer Bedeutung sind. R. Sánchez und A. Šali führen in die vergleichende Modellierung ein und beschreiben anhand zahlreicher Beispiele ihre Methoden. Es folgt eine kurze, aber instruktive Zusammenfassung von D. Jones über das Gebiet der Proteinstrukturvorhersage. Hier werden die Möglichkeiten verschiedener Programme in jedem Stadium des Vorhersageprozesses anhand praktischer Beispiele aufgezeigt. B. A. Reva, A. V. Finkelstein und J. Skolnick beschäftigen sich im folgenden Kapitel mit effektiven Energiefunktionen, die bei der Erkennung der Proteinfaltung von Nutzen sein können. In den beiden folgenden Kapitel werden Ab-initio-Methoden zur Proteinstrukturvorhersage vorgestellt: S. Schulze-Kremer beschreibt detailliert die Verwendung genetischer Algorithmen, und E. S. Huang, R. Samudrala und B. H. Park geben einen Überblick über effektive Energiefunktionen. In Kapitel 11 präsentiert R. E. Bruccoleri sein Ab-initio-Programm für die Modellierung von Schleifen. Leider werden wieder nur ein einziger Algorithmus und keine Alternativen vorgestellt. Anschließend behandeln M. De Maeyer, J. Desmet und I. Lasters das „dead-end elimination theorem“ und seine Verwendung bei der Modellierung von Seitenketten, die an ein starres Proteinrückgrat gebunden sind. Über die Klassifizierung von Proteinfaltungen berichtet R. B. Russell in Kapitel 13, wobei er auch kurz auf verschiedene Klassifizierungsmethoden und entsprechende Datenbanken eingeht. M. S. P. Sansom und L. Davison setzen sich mit dem schwierigen, aber biomedizinisch wichtigen Problem der Strukturvorhersage von Membranproteinen auseinander. Sie beschreiben das Modellieren von membrandurchspannenden Helixbündeln mit Moleküldyna-