

zeichnet ist), Stereodeskriptoren an Prochiralitätszentren von α -Homodypnopenacolon und das fehlende HCl in der Formel von Adeninhydrochlorid.

Der Zugang zu dem reichhaltigen Material gelingt hauptsächlich über das ausführliche Register im 5. Band. Ein zusätzlicher Vorteil gegenüber der ersten Auflage ist, daß es nur noch ein Register gibt (die ursprünglich zwei Register wurden zusammengefaßt). Auf dieses wird der Benutzer trotz der alphabetischen Anordnung der Verbindungen in den ersten vier Bänden häufiger zugreifen müssen, da bei gängigen Trivialnamen (z.B. Acetylsalicylsäure, Fumarsäure, Vinblastin, Vincristin) gelegentlich auf selten verwendete Synonyme oder auf Handelsnamen verwiesen wird. Dies gilt in verstärktem Maße auch bei internationalen Freinamen (INN) von Arzneistoffen (z.B. Thalidomid, Paracetamol, Levcromakalim), die häufig unter einem Handelsnamen verzeichnet sind, ohne daß diese als solche kenntlich gemacht wurden. Es sei nur auf die rechtlichen Probleme hingewiesen, die bei der Verwendung von eingetragenen Warenzeichen auftreten können. Schwerwiegender ist jedoch, daß diese in der Regel kein Synonym für den Wirkstoffnamen sind. So wird beispielsweise für Indometacin auf Amuno, das eingetragene Warenzeichen für ein Fertigarzneimittel, verwiesen, das neben dem Wirkstoff auch noch einige Formulierungshilfsstoffe enthält. Ein weiterer Nachteil ist, daß die INN, wie die ebenfalls international gültigen Common Names im Bereich der Pflanzenschutzmittel, nicht hervorgehoben sind, obwohl sie zur Deklaration von Inhaltsstoffen von Formulierungen zu verwenden sind. Für einige Arzneistoffe (z.B. cromoglicic acid, Crotetamid) ist die korrekte Schreibweise der INN nicht einmal aufgenommen, andere fehlen leider ganz, z.B. Dizocilpin, Efavirenz, Fosinopril und Nepaprazol.

Der an Synonymen, Handelsnamen, Forschungskürzeln oder Abkürzungen für eine Verbindung Interessierte kann über den Registereintrag des Namens, unter dem die betreffende Verbindung mit Formel abgebildet ist, fündig werden. Allzu hoch sollten die Erwartungen aber bei Abkürzungen nicht sein. Nur „Abkürzungen und Akronyme wichtiger Verbindungen“ wurden aufgenommen.

Hier läßt sich allerdings fragen, was eine „wichtige Verbindung“ ist. COD, HE-PES, MCPBA, NMDA und TFA wird der Nutzer vergeblich suchen. PCB, PCP und TEA sind für andere Verbindungen aufgenommen, als in der Literatur gewöhnlich damit gemeint sind. Wegen der häufigen Doppel- und Dreifachbelegung von Abkürzungen und Akronymen ist der Rezensent allerdings der Meinung, daß diese ohnehin eine Aufgabe für ein separates Nachschlagewerk sind.

Insgesamt ist dieses umfangreiche Handbuch trotz der genannten Mängel eine wertvolle Informationsquelle, und es wäre wünschenswert, wenn es eine große Verbreitung finden würde.

Karl-Heinz Hellwich
Beilstein Chemiedaten und
Software GmbH
Frankfurt a. M.

Combinatorial Library Design and Evaluation.

Herausgegeben von Arup K. Ghose und Vellarkad N. Viswanadhan. Marcel Dekker, New York 2001. 631 S., geb. 195.00 \$.— ISBN 0-8247-0487-8

Das Buch enthält insgesamt 20 Beiträge von Autoren aus der Industrie und dem akademischen Bereich und ist in vier Abschnitte eingeteilt. Teil 1 besteht aus einem sehr informativen einführenden Beitrag, der die wesentlichen Grundlagen des Entwurfs von Kleinmolekülbibliotheken behandelt.

Der zweite Teil enthält sechs Beiträge, welche die Prinzipien der Pharmakophormodellierung und der Erstellung quantitativer Struktur-Aktivitäts-Beziehungen, molekulare Dockingmethoden und das weite Gebiet der Gütfunktionen („scoring“) behandeln.

Teil 3 des Buches widmet sich mit acht Beiträgen aktuellen Themen auf dem Gebiet des Bibliotheksentwurfs. Wissensbasierte Verfahren, das „Drug-Likeness“-Konzept, verschiedene Diver-

sitätsmaße, spezielle Algorithmen für virtuelle kombinatorische Ansätze und mehrere aktuelle Ideen zur Definition und Bestimmung „molekularer Ähnlichkeit“ werden ausführlich vorgestellt.

Fünf Kapitel, die sich neben speziellen Verfahren auch der praktischen Anwendung der in den vorangehenden Abschnitten vorgestellten Methoden widmen, machen den vierten Teil des Buches aus. Eine besondere Beachtung findet der aktuelle Trend, verschiedene rechnergestützte Methoden miteinander zu kombinieren und auch in den industriellen Prozess der Wirkstoffsuche zu integrieren. Es wird bei der Lektüre des Buches deutlich, dass eine Methode allein oft nicht zum gewünschten Erfolg führt, sondern in den meisten Fällen erst eine Kombination unterschiedlicher Molekülbeschreibungen, Klassifikations- und virtueller Screeningverfahren zum gewünschten Ziel führen kann, nämlich zu dem Entwurf von Kleinmolekülbibliotheken mit hohen Trefferraten im biologischen und biochemischen Test.

Wie ein roter Faden zieht sich das Thema „Kombinatorische Chemie“ durch alle Kapitel. Es ist bemerkenswert, wie sich das Verständnis dieses Begriffs im Laufe der letzten Jahre verändert hat. Wurden vor einiger Zeit kombinatorisch-chemische Ansätze überwiegend mit der Möglichkeit in Verbindung gebracht, möglichst effizient viele „diverse“ Moleküle zu synthetisieren, so spiegelt sich in vielen der Buchbeiträge deutlich eine moderne, speziell von der industriellen Wirkstoffentwicklung geprägte Sicht wieder: Mit Hilfe von Methoden der kombinatorischen Chemie zusammen mit neuen Algorithmen lassen sich gezielt hinsichtlich einer bestimmten biologischen Aktivität „fokussierte“ Molekülbibliotheken erzeugen, deren Trefferraten mit bis zu mehreren Prozent aktiver Moleküle signifikant über der mittleren Trefferrate von „klassischen“ kombinatorischen Bibliotheken liegen.

Das von Arup Ghose und Vellarkad Viswanadhan herausgegebene Buch bietet meines Erachtens allen, die an diesen Themen interessiert sind, seien es Wissenschaftler oder Studierende, hervorragendes Grundlagenwissen. Es enthält sowohl verständliche einleitende Abschnitte und Übersichtsartikel als auch konkrete Anwendungsbeispiele, die in



geeigneter Weise das komplexe Thema des rechnergestützten Entwurfs kombinatorischer Bibliotheken behandeln und in ausgewogener Weise auch Fachfremden nahe bringen. Diese Kombination ist den Herausgebern ausgesprochen gut

gelungen. Die hohe Qualität des Inhalts aller Beiträge wird begleitet von einer guten formalen Gestaltung des Buches, einem klaren Druck- und Formelsatz und vielen prägnanten Abbildungen und Tabellen, die als Referenz dienen kön-

nen. Ich wünsche dem Buch eine weite Verbreitung – es ist aus meiner Sicht ein gelungenes Werk!

Gisbert Schneider
Hoffmann-La Roche, Basel (Schweiz)