

Strukturdatenbank PDB vorgestellt. Mit der Klassifizierung von Proteinen nicht aufgrund ihrer ähnlichen Sequenzen sondern aufgrund ihrer strukturellen Ähnlichkeit und dem damit verbundenen Zusammenhang zwischen Sequenz, Struktur und Funktion endet das Kapitel.

Im Verhältnis zu den ersten beiden Kapiteln fallen die drei folgenden Kapitel „Genomics“, „Functional Genomics“ und „Proteomics“ deutlich weniger umfangreich aus. Rauhut schneidet zahlreiche aktuelle Themen wie die vergleichende Genomanalyse, Techniken der Genomsequenzierung, die Anwendung der DNA-Chiptechnologie, die Analyse von Einzelbasenaustauschen (SNPs, „single nucleotide polymorphisms“), moderne Methoden der Proteinsequenzierung oder „Pathway“-Datenbanken an. Während jedoch aus den ersten beiden Kapitel sofort einsetzbare praktische Erkenntnisse für die Arbeit mit Sequenzdatenbanken gewonnen werden können, beschränken sich die übrigen Kapitel darauf, thematische Einführungen zu geben. Deren Wert liegt in der Präsentation verschiedener Techniken samt ihrer Möglichkeiten und Beschränkungen, aus der Impulse für die eigene Versuchsgestaltung ausgehen können. Wie in den übrigen Kapiteln wird auch hier auf weiterführende Informationen in Publikationen und im Internet verwiesen.

Insgesamt bietet das Buch eine schöne Übersicht über die Bioinformatik, ohne zu sehr in die mathematischen Tiefen zu dringen. Die Ausführungen über Strukturen von Proteinen und RNA und insbesondere die Strukturvorhersagen gehen meines Erachtens zu sehr ins Detail. Die Strukturvorhersage ist nach wie vor unausgereift und für den durchschnittlichen Anwender im Labor sicherlich kein geeignetes Werkzeug für die beiläufige Beschäftigung. Ebenso erfordern die recht ausführlich beschriebenen Verfahren, mit deren Hilfe strukturelle Ähnlichkeiten verschiedener Proteine analysiert werden können, ein hohes Maß an Fachwissen. Andererseits werden trotz der gewünschten Nähe zur Anwendung mehrere häufig auftretende Fragestellungen nicht angesprochen, z. B. wie mit EST-Datenbanken RNA-Splicing oder komplette cDNA-Bereiche entdeckt werden können oder wie

durch die Kombination verschiedener Datenbanksuchen der genomische Kontext einer experimentell ermittelten unbekannten Sequenz aufgeklärt werden kann.

Das kurze Kapitel über Phylogenetik beschränkt sich auf die Analyse der Verwandtschaft von Genen und Organismen. Gänzlich unerwähnt bleiben moderne mathematische Instrumente wie Netzwerkmethoden in der immer mehr an Bedeutung gewinnenden Populationsgenetik. Dazu Rauhut in seinem Vorwort: „Perfekte Lehrbücher entstehen nicht in der ersten Auflage, sie wachsen vielmehr durch das Feedback der Leser.“ So ist diese erste Ausgabe zwar noch nicht perfekt, aber schon sehr lesenswert.

Martin Forster

Heinrich-Pette-Institut, Hamburg

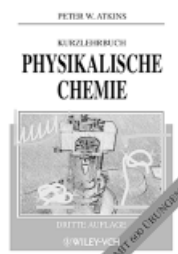
**Kurzlehrbuch Physikalische Chemie.** 3. Auflage. Von *Peter W. Atkins*. Übersetzt von R. Ludwig, A. Appelhagen und F. Schmauder. Wiley-VCH, Weinheim 2001. 859 S., geb. 55.00 €.—ISBN 3-527-30433-9

Das Kurzlehrbuch der Physikalischen Chemie von Peter Atkins liegt nun in einer dritten, völlig überarbeiteten deutschen Auflage vor. Als Zielgruppe hat der Autor Leser im Visier, „die ein Kompendium der wesentlichen Gesichtspunkte dieses Schlüsselbereiches der Chemie benötigen, oder deren Interessen im Umweltschutz, der chemischen Verfahrenstechnik oder auf anderen benachbarten Feldern liegen“. Damit wären Ingenieure und Studierende mit Physikalischer Chemie als Nebenfach angesprochen, aber auch Studienanfänger der Chemie.

Das Buch ist in 21 Kapitel gegliedert und bietet den Stoff im Wesentlichen in der traditionellen Reihenfolge: Nach einer kurzen Einführung zu Aggregatzuständen und Zustandsvariablen werden die Eigenschaften idealer und realer Gase erörtert. Die folgenden Kapitel

behandeln den ersten Hauptsatz der Thermodynamik, die Thermochemie chemischer Reaktionen, den zweiten Hauptsatz, Phasengleichgewichte reiner Substanzen und die Eigenschaften von Mischungen. Zwei weitere Kapitel sind dem chemischen Gleichgewicht gewidmet, das nächste der Elektrochemie im chemischen Gleichgewicht. Der klassische Teil schließt mit je einem Kapitel über chemische Kinetik und zur Interpretation von Geschwindigkeitsgesetzen. In der zweiten Hälfte des Buches sind die Themen zusammengefasst, die nur auf der Grundlage der Quantentheorie verstanden werden können. Folgerichtig wird mit einer kurzen Einführung in die Quantentheorie begonnen, der sich Ausführungen über den Aufbau der Atome anschließen. Die kovalente chemische Bindung wird sowohl im VB- als auch im MO-Ansatz besprochen. Für Festkörper werden die Bändertheorie und Ionenbindung als Grenzfälle dargestellt. Hier findet sich auch ein Unterkapitel über die Symmetrie der Raumgruppen. Ein weiteres Kapitel behandelt die zwischenmolekularen Kräfte mit ausführlicher Berücksichtigung von Biopolymeren, Mesophasen und dispersen Systemen. Es schließen sich drei Kapitel zur Molekülspektroskopie an, worin zunächst die Rotations- und Schwingungsspektroskopie, dann die Spektroskopie elektronischer Übergänge und schließlich die magnetische Resonanz besprochen werden. Das letzte Kapitel zur statistischen Thermodynamik zeigt auf, dass letztlich auch die im ersten Teil makroskopisch beschriebenen Größen auf der Grundlage der Quantennatur der Materie verstanden werden können.

Jedes Kapitel enthält ein oder zwei Exkurse, in denen Anwendungen des gerade Besprochenen an konkreten Beispielen demonstriert werden. Diese Beispiele betreffen in erster Linie biologische Fragestellungen. In den Exkursen und am Ende jedes Kapitels werden Übungsaufgaben gestellt, deren Ergebnisse (aber nicht der Lösungsweg) am Ende des Buches aufgelistet werden. Das Buch wird abgeschlossen mit 10 Zusatzinformationen, in denen die Beschreibung mathematischer Methoden (Differenzieren, Integrieren) sowie grundlegender physikalischer Gesetzmäßigkeiten (Coulomb-Gesetz etc.) erfolgt, einigen Tabellen mit thermodyna-



mischen Daten und einem Stichwortverzeichnis.

Die „Kürze“ dieses Kurzlehrbuches liegt nicht so sehr in einer Reduktion der Themenbereiche. Vielmehr wird jedes Thema knapp und unter weitestgehendem Verzicht auf mathematische Herleitungen abgehandelt. Dabei gelingt es dem Autor durchaus, die wesentlichen Aspekte verständlich herauszustellen. Gegenüber dem „langen“ Lehrbuch desselben Autors fehlen Kapitel über die Molekülsymmetrie und irreversible Thermodynamik.

Für die nächste Auflage würde ich mir noch einige Verbesserungen wünschen. So sind manche Abbildungen zu schematisch und könnten zu Fehlinterpretationen bei den Lesern führen. Beispielsweise werden die Kurven für harmonische Potentiale zwar als Parabeln bezeichnet, sind in Wirklichkeit aber Ellipsenhälften, d.h. sie erreichen bei endlichen Abständen unendliche Steigung. Die Kurve für ein „realistisches“ Potential (Seite 683) ist für Abstände kleiner als der Gleichgewichtsabstand völlig identisch mit der harmonischen Funktion. Antibindende Orbitale haben exakt dieselbe Form wie ihre bindenden Gegenstücke, sie unterscheiden sich nur durch einen Wechsel der Schattierung an der Symmetrieebene. Dies entspricht einem abrupten Wechsel des Vorzeichens ohne stetigen Nulldurchgang. Beide Orbitale hätten dieselbe Elektronendichte zwischen den Kernen. Auch im Text gibt es einige Ungenauigkeiten. Im Kapitel über die NMR-Spektroskopie wird richtig zwischen den Beiträgen der Energierelaxation ( $T_1$ ) und der Phasenrelaxation ( $T_2$ ) zur Linienbreite unterschieden. Bei der Diskussion der optischen Spektren dagegen wird die Stoßverbreiterung als eine Verkürzung der Lebensdauer (Stoß-Desaktivierung, Seite 674) beschrieben. Im Kapitel über NMR ist immer nur von Resonanz die Rede, so als handele es sich um ein anderes physikalisches Grundprinzip als bei anderen Formen der Absorptions- und Emissionsspektroskopie. Das Franck-Condon-Prinzip (Seite 704) wird rein klassisch beschrieben, aber als Erklärung für die beobachtete Schwingungsstruktur elektronischer Spektren ausgegeben. Dabei würde der klassische vertikale Übergang nur zu einer einzigen Anregungsenergie führen. Solche klei-

nen Ungenauigkeiten können gerade bei fachfremden Lesern zur Einprägung von Fehlkonzepten führen.

Sicher sehr nützlich und didaktisch wertvoll sind die Exkurse, die in jedes Kapitel eingeschoben sind und an Beispielen konkrete Anwendungen des gerade Besprochenen vorführen. Die Beispiele sind gezielt meist aus dem Bereich der Biologie gewählt und demonstrieren eindrucksvoll, wie wichtig quantitative physikalisch-chemische Betrachtungen inzwischen in diesem Fach geworden sind.

Wem sollte man dieses Lehrbuch empfehlen? Die Auswahl der vielen Beispiele aus dem Bereich der Biologie legt schon nahe, dass der Autor gerade Studierende dieses Fachs ansprechen möchte. Studierende der Biologie stehen in der Regel noch stärker als die der Chemie in der Gefahr, ihr Studienfach als völlig jenseits physikalischer und mathematisch fassbarer Gesetzmäßigkeiten anzusehen. Da könnte der weitgehende Verzicht auf mathematische Betrachtungen helfen, Hemmungen abzubauen, die erfahrungsgemäß viele Studierende vor einer gründlichen Beschäftigung mit der physikalischen Chemie abschrecken. Diesen motivierenden Effekt sollte das Buch auch auf Studierende mit Hauptfach Chemie haben, insbesondere wenn diese sich für eine spätere Tätigkeit im biologischen Umfeld interessieren. Letztlich wird allerdings meiner Ansicht nach für ein wirkliches Verständnis der Zusammenhänge die Beschäftigung mit der Mathematik unerlässlich sein. Daher würde ich diesen Studierenden raten, sich im Laufe des Studiums ein weiteres Lehrbuch zuzulegen. Ein Buch, das den umgekehrten Weg von der Quantentheorie zur Thermodynamik geht, wäre aus meiner Sicht eine ideale Ergänzung für den Fortgeschrittenen.

Bernhard Dick

Institut für Physikalische  
und Theoretische Chemie  
der Universität Regensburg

**Handbook of Modern Pharmaceutical Analysis.** Von *Satinder Ahuja* und *Stephen Scypinski*. Academic Press, San Diego 2001. 566 S., geb. 124.95 \$.—ISBN 0-12-045555-2

Eine Beschreibung der pharmazeutischen Analytik kann unter verschiedenen Aspekten erfolgen: Die einsetzbaren analytischen Methoden, die Aufgabenfelder und/oder die regulatorischen Anforderungen können im Mittelpunkt des Interesses stehen. Der Aufbau eines Buches über pharmazeutische Analytik wird im Wesentlichen durch die gewünschte Zielgruppe bestimmt. Das ist beim Handbuch für pharmazeutische Analytik der in der Industrie tätige Analytiker. Folgerichtig stellt das realisierte Strukturprinzip die Aufgabenfelder und regulatorischen Aspekte in den Vordergrund, die Kenntnis analytischer Methoden wird weitgehend vorausgesetzt.

Nach einem einführenden Kapitel, das eine gute Übersicht über die Einsatzschwerpunkte pharmazeutischer Analytik gibt, wird in Kapitel 2 die Suche nach Wirkstoffen und ihre Synthese mit Hilfe der kombinatorischen Chemie beschrieben. Die vorgestellten Technologien und die Untersuchungsmethoden sind auf dem neuesten Stand, und ein umfangreiches Literaturverzeichnis erlaubt eine tiefer gehende Beschäftigung mit den Themen. In Kapitel 3 wird die Analyse fester Arzneistoffe behandelt, wobei differenziert wird zwischen Charakterisierungen auf molekularer Ebene (spektroskopische Methoden), auf Partikel- (optische und thermische Methoden) und „Bulk“-Ebene (physikalische Untersuchungen). Es folgen Kapitel über Verunreinigungen und Zersetzungsprodukte von Arzneistoffen sowie Präformulierungsstudien. Beide Kapitel sind sehr umfassend und praxisorientiert, gelungene Graphiken gestatten die schnelle Erfassung von komplexen Zusammenhängen, und die Anhänge zu Kapitel 5 sind sehr hilfreich. Den Autoren ist hoch anzurechnen, dass sie bei der Beurteilung und dem Vergleich der Metho-

