

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 weitest gehendem 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. Bei den 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.

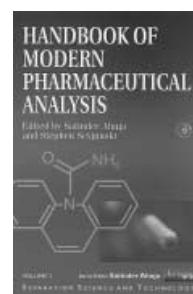
Bernhard Dick

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 Zersetzungprodukte 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-



den nicht den häufig zu beobachtenden Fehler begehen, die modernsten und instrumentell aufwändigsten Methoden als die besten einzustufen. Die nächsten drei Kapitel befassen sich mit den verschiedenen Darreichungsformen. Hier kommt der analytische Aspekt vor allem bei den modernen therapeutischen Systemen zu kurz. Es folgen Kapitel über regulatorische Fragen wie Spezifikationsfestsetzung, Validierung, Methodentransfer und Dokumentation. Außerdem wird auf die Methodenentwicklung (Kapitel 10) und auf Stabilitätsstudien (Kapitel 13) näher eingegangen. Mit dem letzten Kapitel über die elektrophoretische Mikrochip-Technologie wird entgegen dem bisherigen Konzept des Buches eine analytische Methode zum Thema gemacht.

Das Konzept des vorliegenden Buches – Strukturierung nach Aufgabenfeldern – bedingt relativ häufige Wiederholungen in den einzelnen Kapiteln. Insofern kann jedes Kapitel für sich gelesen werden (Handbuch), aber das Lesen mehrerer hintereinander ermüdet. Für den pharmazeutischen Analytiker ist es sinnvoll, ja sogar unbedingt notwendig, seine Arbeit im Kontext mit Synthesechemikern und Galenikern zu sehen. Deshalb halte ich das Konzept für durchaus gut und lohnenswert. Einige Kapitel enthalten meines Erachtens allerdings zu viele fachfremde Informationen. So findet sich im gesamten Kapitel 8 kein Hinweis auf die speziellen Probleme der Analytik etwa von Dosieraerosolen oder Suppositorien. Die Galenik (pharmazeutische Technologie) ist absolut beherrschend. Das Inhaltsverzeichnis ist schlüssig; hierüber findet man zuverlässig die interessierenden Abschnitte. Dagegen lässt das Stichwortregister, das gerade in einem Handbuch möglichst umfangreich sein sollte, zu wünschen übrig: Viele Begriffe tauchen in mehreren Kapiteln auf, der Registerhinweis führt jedoch meist nur in eines. Als gravierender Mangel des Buches ist das Fehlen eines Abkürzungsverzeichnisses zu vermerken. Weitere kleine Mängel wie das Fehlen des Begriffs „Traceability“ im Zusammenhang mit Richtigkeit sind vorhanden, auf ihre kleinliche Aufzählung soll aber verzichtet werden. Das Buch ist sicherlich sehr nützlich für Einsteiger in die pharmazeutische Industrie und für jede dort angesiedelte

Bibliothek. Auch „alten Hasen“ kann es durchaus Anregungen und neue Erkenntnisse vermitteln.

Peter Surmann

Institut für Pharmazie
der Humboldt Universität, Berlin

Object-Oriented Magnetic Resonance. Classes and Objects, Calculations and Computations. Von Michael Mehring und Volker A. Webruss. Academic Press, San Diego 2001. 555 S., geb. (mit CD-ROM) 79.95 \$.—ISBN 0-127-40620-4

In *Object-Oriented Magnetic Resonance* werden die quantenmechanischen Prinzipien der Kernspin- und Elektronenspinresonanz erläutert, die die Grundlage für das Verständnis und die Entwicklung neuer Kernspinresonanz(NMR)-Experimente und Algorithmen darstellen. Die Themenbreite des Buchs ist sehr groß, das Spektrum reicht von der Beschreibung grundlegender Quantenmechanik des Spins bis zu Berichten über spezielle Themen wie die Liouville-Raumentwicklungen. Anwendungen von Multipuls, Mehrquanten und mehrdimensionaler Spektroskopie, sowie Quantenrechnungen bauen auf diesen Konzepten auf. Einführungen in die Festkörper-NMR-Spektroskopie, elektronenparamagnetische Resonanz-(EPR)-Spektroskopie und die Elektron-Kern-Doppelresonanz(ENDOR)-Spektroskopie werden gegeben.

Seit vielen Jahren schon besteht Bedarf an einem Buch, das einen Überblick über das sich dynamisch entwickelnde Gebiet der Festkörper-NMR-Spektroskopie bietet. Besonders in den letzten Jahren haben sich die Methoden und die Gerätetechnik rasant verbessert. Bücher, die sowohl eine grundlegende Einführung in das Gebiet geben als auch praktisches Expertenwissen vermitteln, sind schwer zu finden. Das vorliegende Buch richtet sich nach Angabe der Autoren an Wissenschaftler und graduierende Studierende, die sich in den Bereichen Biologie, Chemie, Materialwissenschaften, Physik und Medizin mit NMR- und EPR-Spektroskopie beschäftigen. Aufgrund der physikalischen Präsentation des Themas ist das Buch jedoch beson-

ders interessant für Physikochemiker und Wissenschaftler mit Vorkenntnissen in der Quantenmechanik.

Die Autoren wählten für ihr Werk einen ansprechenden Titel mit Bezug auf die Objekt-orientierte Programmierung in der Informatik. Tatsächlich können die meisten Pulssequenzelemente als modulare Bestandteile in vielen Anwendungen eingesetzt werden. Im Fall von NMR sind Objekte (nach den Autoren) Operatoren der Spinphysik wie sphärische Tensoroperatoren, Dichteoperatoren usw. Die Gesamtheit der Spinoperatoren, Propagatoren usw. werden als Klassen definiert. Bei der Computerprogrammierung werden die Objekte als Blackboxes behandelt, die einen Code (die NMR-Pulssequenz) und Daten (das zu untersuchende quantenmechanische Spinsystem) enthalten sowie Signale (die strukturellen Fragen an das Spinsystem) empfangen und aussenden können. Eine wichtige Regel bei der Objekt-orientierten Programmierung ist, dass der Anwender eines Objekts niemals einen Blick in die Blackbox werfen soll. Aber gerade das fordern die Autoren von ihren Lesern: Sie beschreiben ausführlich alle Objekte und Klassen, die in der Kernspinresonanz Verwendung finden. Zusätzlich zu den mathematischen, theoretischen und numerischen Themenebenen ist in jedem Unterabschnitt eine Liste mit graphischen Symbolen aufgeführt, die auf wichtige Aussagen, Übungen, Programme im Text oder auf der CD-ROM hinweisen: eine didaktische Maßnahme, die den Lehrbuchcharakter des Buchs unterstreichen soll. Doch nun zum Inhalt der Kapitel im Einzelnen.

In den Kapiteln 1–6 werden die physikalischen Grundkenntnisse für die quantitative Beschreibung der magnetischen Kern- und Elektronenresonanz vermittelt. Hier werden auch die Klassen und Objekte im Hilbert- und Liouville-Raum definiert. Spin-Spin-Wechselwirkungen von Kernen und Elektronen, Quadrupolwechselwirkungen, chemische Verschiebungen, entsprechende Hamilton-Funktionen und ein-dimensionale Spektren werden in Kapitel 7 beschrieben. Außerdem werden MAS(Magic Angle Spinning)-Techniken erläutert. Eine kurze Darstellung der Relaxation am Ende des Kapitels leitet über zu Kapitel 8, in dem Relaxa-