

bundenen besonderen technischen Eigenschaften von „High Performance“-Pigmenten wissen möchte, wird in diesem Buch einen aktuellen und kompetent bewerteten Überblick über alle relevanten Themen finden.

Bisher wurde das große Gebiet der Pigmente meist getrennt nach organischen und anorganischen Pigmenten abgehandelt. In diesem Zusammenhang sind besonders die beiden Monographien *Industrial Organic Pigments* von Willy Herbst und Klaus Hunger und *Industrial Inorganic Pigments* von Gunter Buxbaum zu nennen, die im Verlag Wiley-VCH erschienen sind. Im vorliegenden Buch wird das Forschungsgebiet Pigmente erstmals aus einer anderen Perspektive betrachtet: Hier stehen Pigmente für besonders hochwertige Anwendungen im Vordergrund, die spezielle Anforderungen erfüllen müssen. Anorganische und organische Pigmente werden gleichermaßen berücksichtigt.

Dieses Buch ist nach mehreren internationalen Konferenzen zum Thema „High Performance Pigments“, die in den letzten Jahren in Chicago, Miami, Barcelona und Berlin stattfanden, entstanden. Diese Treffen wurden alle, mit Ausnahme der Berlin-Konferenz, vom Herausgeber dieses Buchs, Hugh M. Smith, geleitet, einem hervorragenden Kenner der Materie mit jahrzehntelanger Industrieerfahrung.

Bislang gibt es keine allgemein akzeptierte Definition von „High Performance“-Pigmenten. Daher wurde während dieser Konferenzen auch häufig über mögliche Definitionen diskutiert, philosophiert und gestritten. Eine der Definitionen stammt von Hugh Smith selbst, der vorschlägt, sie als farbige, schwarze, weiße, perlgänzende, lumineszierende oder fluoreszierende partikelförmige organische oder anorganische Pigmente zu bezeichnen, deren Eigenschaften die höchsten Anforderungen für die jeweilige Anwendung erfüllen. Ein anderer Vorschlag kommt von Fritz Brenzikofer, der die Konferenz in Berlin leitete. Seine Definition ist, im Gegensatz zur sehr technisch orientierten von Hugh Smith, sehr stark vom Pigmentmarkt geprägt: Ein „High Performance“-Pigment ist das richtige Pigment für eine spezielle Anwendung mit genau definierten Qualitätskriterien zu optimierten Pigmentkosten.

Hugh Smith konnte eine Reihe von Experten auf den verschiedensten Gebieten als Autoren für dieses Buch gewinnen. Alle haben lange Erfahrung in der Pigmentindustrie und haben die neuesten Entwicklungen auf ihren jeweiligen Fachgebieten kompetent referiert. Sechs Kapitel des Buches, darunter ein einleitender Überblick von Gunter Buxbaum, sind anorganischen Pigmenten gewidmet. Erstmals wird auch die neue Klasse der Cer-Pigmente vorgestellt. In einem Kapitel wird auf Effektpigmente ausführlich eingegangen. Nicht nur Pigmente mit winkelabhängigen Farbeffekten, sondern auch funktionelle Pigmente mit leitfähigen, magnetischen, IR-reflektierenden und lagersensitiven Eigenschaften werden beschrieben. Im Beitrag über „Crystal Design“ wird gezeigt, wie die Eignung für die verschiedenen technischen Anwendungen von den jeweiligen Kristalleigenschaften der Pigmente abhängt. Diese können gezielt beeinflusst und für die jeweilige Anwendung optimiert werden.

In zwölf weiteren Kapiteln werden die unterschiedlichen Klassen der organischen Pigmente behandelt. Eingeleitet wird dieser Teil von einer Betrachtung des globalen Marktes für organische Pigmente. Expertise auf dem Gebiet der gesetzlichen Regelungen für die Zulassung von neuen Pigmenten wird immer wichtiger und hat einen entscheidenden Einfluss auf den wirtschaftlichen Erfolg eines neu einzuführenden Produkts. Daher werden in zwei Kapiteln regulatorische Fragestellungen mit den Schwerpunkten USA und Europa erörtert. Beiträge über die Analytik und die Toxikologie der Pigmente runden den Inhalt des Buches ab.

In allen Kapiteln werden die Pigmente nach dem System des Color Index International (C.I.) identifiziert. Das ausführliche Inhaltsverzeichnis und das Sachregister machen es dem Leser leicht, gezielt ihn interessierende Themen, Pigmente oder Pigmentklassen zu finden.

Der Leser darf nicht erwarten, dass alle Anwendungen von „High Performance“-Pigmenten in ihrer Vielfalt und im Detail beschrieben werden, denn eine derart umfassende Darstellung ist in einem einzigen Buch wohl kaum möglich. Dennoch bietet das Buch einen guten Überblick über den aktuellen

Stand auf dem Gebiet der „High Performance“-Pigmente und viele Literaturhinweise für den Leser, der sich intensiver mit einzelnen Fachbereichen beschäftigen will.

Gerald Fuchs-Pohl
Merck KGaA, Darmstadt

Free Energy Calculations in Rational Drug Design. Herausgegeben von M. Rami Reddy und Mark D. Erion. Kluwer Academic/Plenum Publishers, New York 2001. 385 S., geb. 127.00 €.—ISBN 0-306-46676-7

Dieses Fachbuch behandelt die Methodik der sogenannten Freie-Energie-Rechnungen (FEP, „free energy perturbation“), die auf Moleküldynamik- oder Monte-Carlo-Simulationen basieren, und insbesondere deren praktische Anwendungen in der Pharmaforschung zum gezielten, strukturbasierten Wirkstoffdesign. Viele der Schlüsselfiguren in diesem Arbeitsgebiet steuerten Beiträge bei, und das Buch offeriert daher eine umfassende, überwiegend aktuelle Darstellung des Themas aus mehreren Blickwinkeln. Die ersten FEP-Rechnungen für Biomoleküle wurden Mitte der 80er Jahre vorgestellt und erzeugten große Hoffnungen, dass man bald in der Lage sein würde, die Bindungsaffinitäten quasi aller beliebiger Liganden an wichtige Proteintargets auf dem Computer berechnen zu können, und somit eine Menge aufwändiger Experimente ersetzen könnte. Leider erwies sich diese Hoffnung als verfrüht, und es bedurfte langer Jahre schrittweiser Verbesserungen, um die Vorzüge und Limitationen der FEP-Methode einschätzen zu lernen. In der Pharmaforschung hat sich die Methode aufgrund dieser Unsicherheiten und wegen des großen Rechenaufwands der Simulationen daher bis heute nicht durchsetzen können. Die Herausgeber sind eines der wenigen Teams in der Industrie, die FEP-Rechnungen seit 10 Jahren mit Erfolg einsetzen. Dieses Buch ist das erste seiner Art, das ausschließlich dem Thema FEP-Rechnungen gewidmet ist. Ein besonderes Merkmal stellt der breite Raum dar, der der Beschreibung von Anwendungen gewidmet ist.

In seiner lediglich sechs Seiten umfassenden Einleitung versteht es J. Andrew McCammon meisterhaft, einen historischen Überblick zu geben, der etwas von der Euphorie der Anfänge, aber auch ihrem Abklingen vermittelt, und den Leser über den derzeitigen Stand der Forschung zu informieren. Weitere herausragende Kapitel zur Methodik von FEP-Rechnungen und zur effizienten Berechnung von Bindungsaffinitäten wurden von Experten wie David Pearlman und Johan Åqvist beigesteuert. Ihre beiden Kapitel zusammen mit der Einleitung sind dem Neuling auf diesem Gebiet als Einstieg zu empfehlen, um einen Blick für die Eigenheiten der FEP-Methode zu entwickeln. Dies ist nämlich bei weitem keine Black-Box-Methode.

Die weiteren Kapitel des Buches sind zum Teil wichtigen neuen Varianten der Methode wie der MM/PBSA-Methode (Kuhn, Kollman und Kollegen) und der λ -Dynamik (C. Brooks et al.) sowie einer Reihe von Anwendungen für wichtige Proteintargets und deren Wechselwirkung mit Inhibitoren gewidmet. Diese Kapitel mit Beispielen aus der praktischen Pharmaforschung dürften das Buch für auf diesem Gebiet arbeitende Firmen und Arbeitsgruppen zu einem unverzichtbaren Kompendium machen. Einige der Beispiele sind absolut neuesten Datums und über jeden Zweifel erhaben, z.B. das zur Thymidylat-Synthase im Kapitel von Kollman et al. und die Beispiele zu COX-2, der SRC-SH2-Domäne, HIV-Reverse-Transkriptase und Thrombin im Beitrag von Jorgensen et al.

Allerdings liegt in der Auswahl der Kapitel eine gewisse Schwäche dieses Buchs. So weisen beispielsweise McCammon und Pearlman darauf hin, dass viele der ersten Studien aus den 80er Jahren aufgrund der notgedrungen sehr kurzen Simulationsdauern nahezu willkürliche Ergebnisse lieferten. Einige dieser Arbeiten sind in diesem Buch jedoch als eigene Kapitel enthalten, ohne dass auf die mittlerweile bekannten Probleme bei der Interpretation der Ergebnisse eingegangen wird. Ohne den Verdienst dieser ersten Arbeiten schmälern zu wollen, haben manche Resultate nur noch historischen Wert. Eine weitere Eigenheit eines Buchs über ein thematisch sehr begrenztes Gebiet mit Bei-

trägen verschiedener Autoren sind natürlich Wiederholungen. So wird der Leser bestimmt in der Hälfte der Kapitel in das Prinzip von thermodynamischen Zyklen eingeführt. Zwei weitere einführende Kapitel sind dem MM3-Kraftfeld gewidmet und impliziten Lösungsmittelmodellen (C. Cramer und D. Truhlar). Obwohl die Korrektur von absoluten freien Bindungsenthalpien auf Standardbedingungen (siehe Arbeiten von M. K. Gilson und J. Hermans im Jahr 1997) an mehreren Stellen erwähnt wird, hätte dieses Thema eine Diskussion in einem separaten Kapitel verdient. Denn dieser Punkt ist von besonderer Wichtigkeit, wenn sich die FEP-Methode (hoffentlich!) in der Pharmaforschung in Zukunft durchsetzen wird.

Insgesamt erlaubt dieses Buch sowohl dem Modellierer in einer Pharmafirma, als auch einem Doktoranden in einer universitären Arbeitsgruppe, sich innerhalb kurzer Zeit mit der FEP-Methode und ihren Erfolgsaussichten vertraut zu machen. Es richtet sich an ein spezielles Leserpublikum und wird vermutlich über lange Jahre hinweg die einzige Monographie zu diesem Thema bleiben. Allein das macht bereits seinen besonderen Wert aus.

Volkhard Helms

Max-Planck-Institut für Biophysik
Frankfurt a. M.

Organic Synthesis Engineering. Von L. K. Doraiswamy. Oxford University Press, Oxford 2001. XVIII + 918 S., geb. 150.00 £.—ISBN 0-19-509689-4

Mit *Organic Synthesis Engineering* hat L. K. Doraiswamy ein Buch konzipiert, das sowohl die Reaktionstechnik als auch die Katalyse organischer Reaktionen umfassend darstellt und miteinander verbindet. Im Unterschied zu klassischen Lehrbüchern der Reaktionstechnik beinhaltet das Buch daher auch gute und umfangreiche Kapitel zur Katalyse. Die Reaktionstechnik bleibt allerdings der Schwerpunkt des Buches. Die Konsequenz dieses Ansatzes ist ein über 900 Seiten starkes Lehrbuch.

Im 1., 3. und 4. Teil des Werkes wird die Reaktionstechnik in üblicher Weise abgehandelt. Lediglich die Ausführun-

gen zum Verweilzeitverhalten von Reaktoren sind etwas zu knapp. Ausführlich wird auf die thermodynamische Nichtidealität von Reaktionsmischungen eingegangen, was leider bislang in Lehrbüchern noch nicht allgemein üblich ist. Ebenso auffallend ist die Breite mit der spezielle Themen der Reaktionstechnik, z.B. Semi-batch-Betrieb oder instationäre Zustände dargestellt werden. Sehr gelungen ist der 2. Teil des Buches, in dem die wesentlichen Prinzipien der heterogenen und homogenen Katalyse anhand vieler technisch relevanter Beispiele, die das Lesen interessanter machen, vermittelt werden. Das Prädikat „modern“ verdient das Buch vor allem wegen seines 5. Teils, in dem neue Konzepte der Reaktionstechnik, die zu verbesserten Selektivitäten und Reaktionsgeschwindigkeiten führen, derart ausführlich vorgestellt und diskutiert werden, wie es in einem gewöhnlichen Lehrbuch nicht zu finden ist. Themen wie mehrphasige flüssige Reaktionsführung, bio- und elektrochemische Synthesen, Ultraschall-, Membran-, Mikrowellen, und multifunktionelle Reaktoren sowie Synthesen unter überkritischen Bedingungen werden detailliert abgehandelt.

Als Zielgruppe sieht der Autor sowohl Chemiker als auch Verfahrenstechniker. Dies unterstreicht er, indem er oftmals im Buch die jeweilige Gruppe direkt anspricht. Dies gelingt größtenteils, da Doraiswamy den Kern des Reaktordesigns, die chemische Reaktion, nicht verallgemeinert oder an wenigen Beispielen darstellt, sondern als Ursprung des Reaktorkonzeptes in den Vordergrund stellt, sodass im Buch ungewöhnlich viele Ausführungen rein chemischer Natur sind. Unseres Erachtens wird die Reaktionstechnik für Chemiker zu detailliert behandelt, und der Stoff geht über ein ausreichendes Grundwissen weit hinaus. Der Verfahrenstechniker findet jedoch eine interessante Zusammenstellung der wesentlichen chemischen Aspekte und erhält Antworten auf Detailfragen zur Reaktionstechnik.

Wegen der Fülle der Themen und der detaillierten Beschreibung ist das Buch als Lehrbuch für ein Studium kaum geeignet, es sei denn, der Leser hat reichlich „Mut zur Lücke“. Auf den ersten Blick erweckte das Buch den Eindruck, dass lediglich ein fest gebun-