

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 Neuiling 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  $\lambda$ -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 schmäleren 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 speziellen 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.

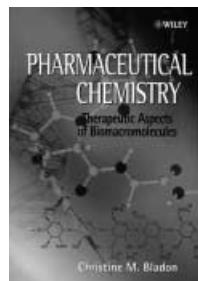
Wegen der Fülle der Themen und der detaillierten Beschreibung ist das Buch als Lehrbuch für ein Studium kaum geeignet, es sei denn, der Leser hat reichlich „Mut zur Lücke“. Auf den ersten Blick erweckte das Buch den Eindruck, dass lediglich ein fest gebun-

denes Manuskript vorliegt und kein modernes Lehrbuch. Insbesondere die Grafiken und Abbildungen sind nicht mehr zeitgemäß. Da ein ansprechendes Layout und ein modernes Design nicht nur die Lektüre erleichtern, sondern auch bei der Kaufentscheidung eine Rolle spielen, sind sowohl die innere als auch die äußere Aufmachung des Buches stark modernisierungsbedürftig. Das derzeitige Erscheinungsbild schmälerst den positiven Eindruck des inhaltlich gelungenen Werkes.

Jörg Unger, Ralf Böhling  
BASF Aktiengesellschaft, Ludwigshafen

**Pharmaceutical Chemistry.** Therapeutic Aspects of Biomacromolecules. Von *Christine M. Bladon*. John Wiley & Sons Ltd., New York 2002. XII + 221 S., Broschur 24.95 £.— ISBN 0-471-49637-5

Biopolymere werden in diesem Buch, das auf einer Vorlesungsreihe im Bereich Pharmazeutischer Chemie basiert, unter therapeutischen Gesichtspunkten vorgestellt. Obwohl die Zielgruppe Studierende der Pharmazie sind, ist die Lektüre fortgeschrittenen Studierenden der Chemie und Biologie sowie Wissenschaftlern, die sich für dieses Gebiet der Pharmazeutischen



Chemie interessieren, ebenfalls zu empfehlen.

Das Buch ist in sechs Kapitel gegliedert und enthält außerdem einen Anhang, ein Glossar und ein Stichwortverzeichnis. Kapitel 1, in dem interessante medizinische und therapeutische Herausforderungen vorgestellt werden, ist eher eine anregende Einstimmung als eine Einführung in das Thema. Dem Neuling auf dem Gebiet ist zu empfehlen, im Anschluss an dieses Kapitel den Anhang zu lesen, in dem er seine Kenntnisse über die monomeren Bausteine der im Text behandelten Biopolymere auffrischen kann. Die Autorin teilt diese Biopolymere in drei Hauptklassen ein: Proteine, Nucleinsäuren und Polysaccharide. Eine weitere, übergeordnete Gliederung in „Gene Cloning“, „Protein Engineering“ und „Immunology“ führt zu einer etwas zusammenhänglosen Behandlung des Stoffs. So werden beispielsweise die Impfung vor der zellvermittelten Immunantwort und chimäre und humanisierte Antikörper vor der Hybridom-Technik besprochen. Das Thema HIV wird abgehandelt, bevor auf die T-Helferzellen eingegangen wurde, und der Leser lernt verkapselte Polysaccharide erst kennen, nachdem das Thema Vakzine längst abgeschlossen ist. Jemand, der mit der Materie vertraut ist, kommt mit dieser Organisation leicht zurecht, aber ein Einsteiger wird vermutlich Probleme bekommen. Ein weiterer Kritikpunkt ist die uneinheitliche Tiefe und Breite, mit der die Themen vermittelt werden. Die Immunsuppression wird beispielsweise sehr detailliert abgehandelt, aber die verschiedenen Klassen der Immunglobuline werden

nicht erwähnt. Auch die Abzyme werden nicht vorgestellt, während die Ribozyme eingehend diskutiert werden. Wichtige Themen, z.B. die Frage, wie sich die Fähigkeit entwickelt, eigen und fremd zu erkennen, oder das Provirüs-Konzept bleiben unerwähnt. Weiterhin werden bedeutende Bereiche der pharmazeutischen Technologie wie die kontrollierte Freisetzung von Biopolymeren am Wirkort und die Herausforderungen bei der Formulierung, Stabilisierung und Analyse biopolymerer Arzneistoffe nicht behandelt.

Trotz dieser Mängel verdient die Autorin Lob für dieses gut lesbare und interessante Buch, das den Stoff aus einer Vielzahl von Disziplinen nahezu fehlerfrei zusammenfasst. Alle Abbildungen sind von hoher Qualität, fehlerfrei und ausführlich erläutert. Jedes Kapitel schließt mit einem Literaturverzeichnis ab. Der Inhalt des im Mai 2001 verfassten Buchs ist aktuell; sogar im gleichen Jahr erschienene Arbeiten werden zitiert. Angaben zur Autorin werden nicht gemacht, aber ihr Werk lässt vermuten, dass sie ausgebildete Chemikerin mit ausgezeichneten Kenntnissen in Biologie und Pharmazie ist. Die Lektüre von *Pharmaceutical Chemistry* ist jedem zu empfehlen, der sich für die therapeutische Verwendung von biologisch relevanten Makromolekülen interessiert.

Robert J. Linhardt  
Division of Medicinal and  
Natural Products Chemistry  
Departments of Chemistry and  
Chemical and Biochemical Engineering  
University of Iowa, Iowa City (USA)