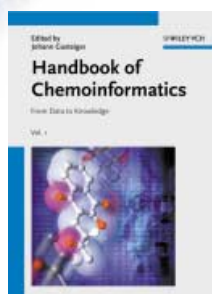




## Handbook of Chemoinformatics



From Data to Knowledge. Bände 1–4. Herausgegeben von **Johann Gasteiger**. Wiley-VCH, Weinheim 2003. LX + 1870 S., geb., 699.00 €.—ISBN 3-527-30680-3

„Chemieinformatik ist die Anwendung von Methoden der Informatik zur Lösung chemischer Probleme“. Mit dieser klaren Definition beschreibt Johann Gasteiger als Herausgeber den Inhalt des *Handbook of Chemoinformatics*. Das Werk umfasst vier Bände mit insgesamt 1870 Seiten, und die Liste der Verfasser der Beiträge liest sich wie das Who-is-Who dieses Forschungsgebietes. Insgesamt 93 namhafte Autoren, die ihrerseits in vielen Fällen selbst Herausgeber wissenschaftlicher Werke oder Buchautoren sind, haben 72 Kapitel beigegeben. Johann Gasteiger ist das Meisterstück gelungen, diese Forschergemeinschaft in einem einzigen Werk unter einem Begriff zu vereinen.

Das *Handbook of Chemoinformatics* ist nicht allein ein Nachschlagewerk, wie der Titel vielleicht vermuten lassen könnte, vielmehr sind die Kapitel in einer didaktisch gelungenen Weise sortiert und jeweils mit einer in das Thema einführenden Einleitung versehen. Die inhaltliche Gruppierung der Kapitel führt im ersten Band von den Grundlagen der Darstellung der Struktur chemischer Verbindungen über die Modellierung chemischer Reaktionen hin zu Datenmodellen und modernen Analyseverfahren der chemieinformati-

schen Methodenpalette. Band 2 widmet sich im Schwerpunkt den vielfältigen chemischen Datenbanksystemen und den unterschiedlichen, aber komplementären Methoden zur systematischen Datenbankrecherche. Band 3 ist zweigeteilt in einen theoretischen Abschnitt und einen Anwendungsteil. Es werden die zum Teil komplexen Prinzipien der Eigenschaftsberechnung von quantenmechanischen Ansätzen bis zur heuristischen Modellbildung detailliert vorgestellt und mit passenden Anwendungsbeispielen veranschaulicht. Jüngste Verfahren des maschinellen Lernens werden dabei ebenso behandelt wie klassische Methoden zur quantitativen Modellierung von Struktur-Aktivitäts-Beziehungen und die rechnergestützte Spektrenauswertung. Im vierten Band steht das Moleküldesign thematisch im Vordergrund, nicht zuletzt weil die Chemieinformatik mittlerweile einen festen Platz in der pharmazeutischen Forschung einnimmt. Algorithmen zur Syntheseplanung und Verfahren für die Diversitätsanalyse von Molekülbibliotheken und den strukturbasierten Entwurf potenzieller Wirkstoffe werden mit den meisten relevanten Methoden und ihren jeweiligen Anwendungsdomänen übersichtlich dargelegt. Schließlich wird eine Brücke geschlagen zur Bioinformatik und zum Gebiet der „Chemogenomics“.

Abgerundet wird das Ganze durch einen übersichtlichen Index. Die Präsentation und Verarbeitung der Bücher ist einwandfrei, die zahlreich und farbig bebilderten Seiten sind übersichtlich gestaltet und bieten an den Rändern genug Platz für eigene Anmerkungen. Eine schöne Idee ist die Vorstellung der Autoren in einem „Steckbrief“ mit Foto zu Beginn jedes Beitrags.

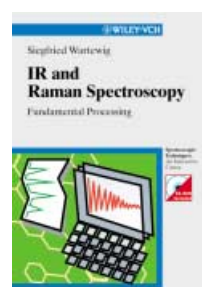
Mehrfach wird darauf verwiesen, dass auf dem Gebiet der Chemieinformatik schon lange gearbeitet werde, der Name „Chemieinformatik“ („Chemoinformatics“ oder „Cheminformatics“ im Englischen) selbst aber noch nicht lange gebräuchlich ist. Das vorliegende Werk ist die erste umfassende Darstellung dieses sehr aktiven Forschungsgebiets und kann ohne Einschränkung empfohlen werden. Willkommen wäre vielleicht eine Internetversion zu einem etwas günstigeren Preis. Dem *Handbook of Chemoinfor-*

*matics* ist zu wünschen, dass es zu gegebener Zeit überarbeitet wird und sich auf diese Weise ständig mit dem Fachgebiet weiterentwickeln und seinen Status als Referenzwerk behaupten kann.

*Gisbert Schneider*

Institut für Organische Chemie  
Universität Frankfurt a. M.

## IR and Raman Spectroscopy



Fundamental Processing. (Reihe: Spectroscopic Techniques. An Interactive Course). Von **Siegfried Wartewig**. Wiley-VCH, Weinheim 2003. XVI + 175 S., geb. + CD-Rom, 129.00 €.—ISBN 3-527-30245-X

Das vorliegende Buch von Siegfried Wartewig ist ein neuer Band in der Reihe „Spectroscopic Techniques: An Interactive Course“. In den vier vorhergehenden Bänden wurden hauptsächlich NMR-spektroskopische Themen behandelt, dass nun die schwingungsspektroskopischen Methoden IR- und Raman-Spektroskopie gewählt wurden, spiegelt die in den letzten Jahren gestiegene Bedeutung dieser Methoden auf allen Feldern naturwissenschaftlicher Forschung, Produktion und Überwachung wider. Mit ausschlaggebend für das erstaunliche Comeback dieser „alten“ Methoden waren neue Entwicklungen in der Gerätetechnik (Fourier-Transformationstechnik, Lasertechnik, ladungsgekoppelte Bauelemente (CCDs), Array-Detektoren, Lichtleiteroptiken usw.) sowie die Verfügbarkeit von zunehmend leistungsfähigeren und preisgünstigeren Computern. Moderne IR- und Raman-Geräte sind mit umfangreichen Softwarepaketen ausgestattet, die nicht nur zur Datenaufnahme dienen, sondern auch eine

große Fülle von Bearbeitungs- und Auswertemöglichkeiten bieten. Diese erscheinen dem Einsteiger oft unüberschaubar, und hier liegt der Ansatzpunkt des Buches.

Das erklärte Ziel des Autors (Kapitel 1) ist, Anfängern auf dem Gebiet der praktischen IR- und Raman-Spektroskopie (fortgeschrittenen Studierenden, Laboranten, Technikern) mit den zahlreichen zur Verfügung stehenden „tools“ vertraut zu machen. Dies geschieht in vorbildlicher und sehr praxisbezogener Weise in einem interaktiven Kurs durch ein didaktisch geschicktes Zusammenspiel von Text, Software und spektralen Daten. Um ein „Learning by Doing“ zu ermöglichen, steht auf der mitgelieferten CD-ROM die Demoversion von Opus 4.2, der neuesten Spektroskopie-Software der Firma Bruker Optics, zur Verfügung. Dies ist sicher eine gute Wahl, denn Opus ist ein weit verbreitetes, ausgereiftes und außerordentlich leistungsfähiges Softwarepaket. Ein Hinweis auf vergleichbare Produkte anderer Hersteller, z. B. auf die Spektroskopie-Software Grams der Firma Thermo Galactic, mit der man dieses Buch auch hätte gestalten können, wäre jedoch angezeigt gewesen.

Nach der in Kapitel 2 beschriebenen und in der Praxis problemlos durchzuführenden Installation auf einem handelsüblichen modernen PC (Mindestvoraussetzungen: Intel-PIII-Prozessor, 800 MHz, Betriebssysteme MS Windows-NT, Windows 2000 oder Windows XP) steht eine ausreichend große

Sammlung von 171 Dateien von IR- und Raman-Spektren zur Verfügung, mit denen die in den insgesamt 13 Kapiteln des Buches beschriebenen Funktionen des Programms geübt werden können. Im Rahmen der Spektrensuche (Kapitel 11) kann zusätzlich auf eine Bibliothek von 350 IR- und 246 Raman-Spektren zugegriffen werden. Es sei darauf hingewiesen – und diesen Hinweis habe ich vermisst –, dass eine eventuell bereits auf dem Computer vorhandene alte Opus-Version vor der Installation der Demoversion entfernt werden sollte, da sie sonst nicht mehr funktionsfähig ist. Wie von einer Demoversion zu erwarten, stehen natürlich nicht alle Funktionalitäten der Vollversion zur Verfügung. Nicht möglich ist das Speichern von veränderten Dateien, das Öffnen eigener Dateien sowie der Import von Spektren in anderen Dateiformaten.

Kapitel 3 führt in die Grundfunktionen von Opus ein (Aufbau und Umgang mit Fenstern, Laden und Entladen von Dateien). Die physikalischen Grundlagen der IR- und Raman-Spektroskopie werden in Kapitel 4 auf nur sieben Seiten abgehandelt. Diese Beschränkung auf das Wesentliche ist für den Zweck des Buches ausreichend, wenn gleich man eine klare Definition von Begriffen wie Einstrahlspektrum, Transmissions- und Absorptionsspektrum vermisst. Den Grundlagen der Fourier-Transformationstechnik sind in Kapitel 5 dagegen immerhin sechzehn Seiten gewidmet. Die für die Praxis wichtigen

Funktionen der Apodisierung, des Zerofillings und der Phasenkorrektur werden an Beispielen gut erläutert.

Die weitere Untergliederung des Buches (Kapitel 6–13) orientiert sich streng an der Menüleiste von Opus. Die wichtigsten Funktionen innerhalb der einzelnen Menüpunkte *Files*, *Edit*, *View*, *Window*, *Manipulating*, *Evaluating*, *Display* und *Print* werden im Detail in eigenen Kapiteln besprochen, in Abbildungen erläutert und an Beispielen geübt, wobei Auswahl und Reihenfolge dem Leser überlassen bleiben. Von der Besprechung ausgenommen bleiben lediglich einige wenige Menüunterpunkte, die weitergehende Anwendungen betreffen (quantitative Analyse von Stoffgemischen, Druckvorlagen-Editor, Programmierung von Makros).

Den zur Zielgruppe des Buches gehörenden Lesern – fortgeschrittenen Studierenden, Technikern und Laboranten –, die sich in die Analyse von Schwingungsspektren einarbeiten wollen, kann dieses Buch wärmstens empfohlen werden. Sie werden vom Studium des didaktisch gut gestalteten interaktiven Kurses viel profitieren und den notwendigen Zeitaufwand zur Einarbeitung in die neue Methode stark verkürzen.

Hans Peter Reisenauer  
Institut für Organische Chemie  
Universität Gießen

DOI: 10.1002/ange.200385115