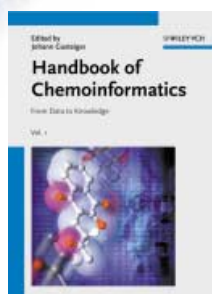




Handbook of Chemoinformatics



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-*

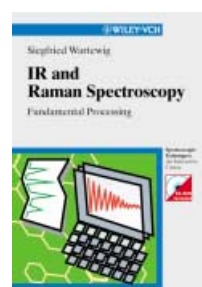
matics ist zu wünschen, dass es zu gegebener Zeit überarbeitet wird und sich auf diese Weise ständig mit dem Fachgebiet weiterentwickeln und seinen Status als Referenzwerk behaupten kann.

Gisbert Schneider

Institut für Organische Chemie
Universität Frankfurt a. M.

DOI: 10.1002/ange.200385106

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