



Experimental Design for Combinatorial and High Throughput Materials Development



Herausgegeben von James N. Cawse. John Wiley & Sons, New York 2003. 317 S., geb., 58,50 £.—ISBN 0-471-20343-2

Kombinatorische und Hochdurchsatz-Methoden sind derzeit von besonderem Interesse in der Material- und Polymerwissenschaft. Ausgelöst durch kleine Start-up-Unternehmen und große multinationale Firmen, finden solche Techniken verstärkt Anwendung in der Forschung und Entwicklung in Industrie und Hochschule. Vorliegendes Buch, herausgegeben von James N. Cawse, ist ein aktueller Beitrag zum Thema und für Anfänger und Fortgeschrittene gleichermaßen geeignet. Inhaltlich deckt es das komplette Feld der kombinatorischen Materialforschung ab, einschließlich Anorganika, Katalysatoren und Polymere. Im Unterschied zu den meisten anderen Büchern zum Thema, die derzeit auf dem Markt erscheinen, beschäftigt sich vorliegendes Werk mit dem intellektuellen Schlüsselschritt der kombinatorischen Forschung, nämlich der Planung des Experiments. In 13 Kapiteln, mit über 200 Abbildungen und Tabellen, werden zuerst die heutigen Standardmethoden vorgestellt und der Stoff dann schrittweise bis zur Diskussion von neuen und hochaktuellen

mathematischen Entwicklungen fortgeführt.

Das erste Kapitel stellt den thematischen Hintergrund vor, wobei der aktuelle Stand der kombinatorischen Materialforschung, die Situation in der pharmazeutischen kombinatorischen Forschung, historische Beispiele und die „kombinatorische Explosion“ vergleichend analysiert werden. Besonders eindrucksvoll ist die Diskussion der theoretisch zugänglichen Zahl von Verbindungen bei Verwendung des kompletten Periodensystems. Überzeugend wird erklärt, warum gerade ein kombinatorisches Experiment exakt geplant werden muss, insbesondere wenn Automationskomponenten mit einbezogen sind („A poorly designed experiment will give bad information with unprecedented speed and in outstanding quantity“ oder „If anything, planning must be done even more carefully, since we now have the possibility of going in the wrong direction faster than ever“). Persönlich halte ich dieses Kapitel für vorzüglich und besonders auch für den Unterricht geeignet, auch wenn es aus einer industriellen Sichtweise geschrieben wurde.

In Kapitel 2 stellt der Herausgeber seinen eigenen Standpunkt zur Entwicklung des Themas dar und führt in die nachfolgenden Kapitel ein, die allesamt von anerkannten Fachleuten auf dem Gebiet (u.a. Robert van Dover, Eric Amis, Manfred Baerns) verfasst wurden. Wichtige Schlagwörter, die einem hier begegnen, sind „optimization strategies“, „non-intuitive experiments“, „experimental space“, „descriptors“.

Die Kapitel 3 und 4 passen nicht wirklich in das Konzept des Buches. Hier werden Maskierungsmethoden, präparative Ansätze, Strategien für eine Erkundung des Phasenraumes von anorganischen Mischsystemen und eine große Bandbreite an Charakterisierungstechniken diskutiert. Die Themen Design und Planung sind leider keine integralen Bestandteile dieser Kapitel. Dies gilt im Prinzip auch für Kapitel 5, in dem der bekannte NIST-Ansatz zur Herstellung von dünnen Filmbibliotheken mithilfe kontinuierlicher Gradienten beschrieben ist: Auch hier werden nur einige wenige statistische Erwägungen diskutiert.

Die folgenden Kapitel zum „optimal-coverage“-Ansatz und zu überlappenden Gradienten-Arrays behandeln das Design und die Evaluierung von kombinatorischen Experimenten. Diskutiert wird insbesondere das Gradientendesign bei stufenweisen robotergeteuerten Formulierungen. Die Vor- und Nachteile des Split-plot-Designs sind Thema in Kapitel 8. Diese Ansätze werden vor allem für das „Design of Experiments“ in komplexen Mischungen und Prozessen verwendet. Die folgenden zwei Kapitel diskutieren ausgefeiltere Optimierungsstrategien, nämlich den Einsatz von genetischen Algorithmen und künstlichen neuronalen Netzwerken. Diese Techniken werden insbesondere für hochkomplexe und nichtintuitive experimentelle Phasenräume verwendet. Kapitel 11 beschäftigt sich mit dem wichtigen Thema der Deskriptorenerstellung sowie mit quantitativen Struktur-Eigenschafts-Beziehungen. In Kapitel 12 und 13 schließlich werden mit der Beschreibung von Monte-Carlo- und Spatial-Sampling-Schemata zwei sehr unterschiedliche Ansätze für Bibliotheken und experimentelles Design vorgestellt. Abgerundet wird das Buch durch ein umfangreiches Stichwortverzeichnis.

Insgesamt gibt es nur Weniges zu kritisieren. Neben dem schon erwähnten Fehlen von Design-of-Experiments-Aspekten in den Kapiteln 3 und 4 ist eigentlich nur zu bemängeln, dass einige Abbildungen wiederholt werden (schwarzweiß sowie farbig). Dies sind aber nur marginale Kritikpunkte, die den sehr positiven Gesamteindruck in keiner Weise schmälern. Das Buch leistet einen sehr wichtigen Beitrag für die kombinatorische Materialforschung und wird sowohl Anfängern, Studenten, praktizierenden Forschern wie auch Spezialisten in „Experimental Design“ von Nutzen sein.

Ulrich S. Schubert

Eindhoven University of Technology & Dutch Polymer Institute (DPI)
Eindhoven (Niederlande)

DOI: 10.1002/ange.200385086