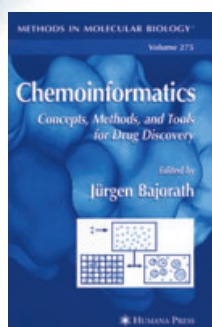




Chemoinformatics



Concepts, Methods, and Tools for Drug Discovery. Herausgegeben von *Jürgen Bajorath*. Humana Press, Totowa 2004. 524 S., geb., 125.00 \$.—ISBN 1-58829-261-A

Die Chemieinformatik hat sich als ein eigenständiges Forschungsgebiet etabliert. Sie hat vielfache Ursprünge, insbesondere in den Traditionen chemierelevanter Datenbanken und der Extraktion informationsreicher Merkmale chemischer Substanzen, der Modellierung quantitativer Struktur-Aktivitäts-Beziehungen (QSAR) sowie der Algorithmenentwicklung und deren Einsatz für die Syntheseplanung und das Moleküldesign. Die vorliegende Monographie widmet sich diesen Themen in Form einer Sammlung von Aufsätzen mit dem Schwerpunkt Wirkstoff-Findung als Klammer. Der Herausgeber, selbst ein anerkannter Experte der Chemieinformatik, hat darin den Versuch unternommen, die Vielfalt dieses Forschungsgebiets in einem Mehrautorenbuch darzustellen.

Insgesamt 24 zum Teil sehr renommierte Autoren aus der pharmazeutischen Industrie und der akademischen Welt haben die insgesamt 19 Kapitel des mehr als 500 Seiten starken Werks verfasst. Inhaltlich wird ein weiter Bogen gespannt, der von der lehrbuchartigen Einführung in Aspekte der chemischen Ähnlichkeitssuche, QSAR-Modellierung und Methoden der molekula-

ren Diversitätsanalyse bis hin zu praxisnahen Beispielen zur Anwendung von chemieinformatischen Konzepten in der Medizinischen Chemie, beim Aufbau kombinatorischer Molekülbibliotheken und bei der Vorhersage von pharmakologisch relevanten Moleküleigenschaften reicht. Ebenso breit gefächert sind die Kapitel in formaler wie inhaltlicher Hinsicht. Neben weit ausholenden Übersichtsartikeln finden sich Beiträge – etwa über Deskriptorberechnung –, die sich eher wie Originalarbeiten lesen. Einzelne Autoren haben sich die Mühe gemacht, eine vergleichende Analyse unterschiedlicher Methoden anzufertigen oder einen vertiefenden mathematischen Anhang bereitzustellen. Nicht nur der Praktiker wird dies sicher als hilfreich empfinden. Einige Beiträge sind hingegen recht kurz und oberflächlich ausgefallen. Diese Diskrepanz ist zu bedauern, denn jedem der aus meiner Sicht sinnvoll ausgewählten Themen wäre eine gleich hohe Qualität und Tiefe der Beiträge angemessen. Hinsichtlich der Aktualität sind ebenfalls Unterschiede auszumachen, wenn gleich keiner der Beiträge aus dem Rahmen fällt.

Mein Fazit: ein weit gefächelter Blick auf die Chemieinformatik, der zwar nicht in jedem Punkt den aktuellsten Stand widerspiegelt (dies ist zugegebenermaßen schwierig bei einem so umfangreichen Mehrautorenbuch und einem sich derart rapide entwickelnden Gebiet), aber dem Leser viele kreative Ideen vermittelt und die Praxisnähe der Chemieinformatik verdeutlicht. Das Buch ist als Band 275 der Reihe „Methods in Molecular Biology“ erschienen und konsequent in dem für diese Buchreihe typischen Stil und Layout gehalten. Sämtliche Abbildungen sind in Schwarzweiß wiedergegeben, wenngleich etwas Farbe an einigen Stellen gut getan hätte. Die Moleküldarstellungen sind uneinheitlich, gleiches gilt für die mathematische Formelschreibweise. Dieser formale Aspekt stört zwar etwas die Lesbarkeit, schmälert die ganz überwiegend hohe Qualität der Beiträge jedoch nicht. Leider findet sich dennoch ein Wermutstropfen: Sowohl das Inhalts- wie auch das Stichwortverzeichnis sind dürftig ausgefallen, zudem stimmen bei einigen Registerverweisen die Seitenzahlen nicht. Dies ist

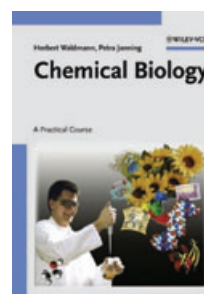
ärgerlich, denn bei einem so umfangreichen Buch mit z.T. überlappenden Inhalten muss ein Navigieren und vergleichendes Lesen möglich sein.

In jedem Fall hat mich das Buch von der ersten Seite an gefesselt, und ich möchte es jedem empfehlen, der auf dem Gebiet der Chemie- oder Bioinformatik arbeitet. Ohne selbst den Anspruch zu haben, ein Lehrbuch zu sein, ist es eine sinnvolle Ergänzung zu den wenigen bereits auf dem Markt befindlichen Lehrbüchern der Chemieinformatik.

Gisbert Schneider

Institut für Organische Chemie und Chemische Biologie
Johann Wolfgang Goethe-Universität
Frankfurt am Main

Chemical Biology



A Practical Course. Von *Herbert Waldmann* und *Petra Janning*. Wiley-VCH, Weinheim 2004. 220 S., geb., 34.90 €.—ISBN 3-527-30778-8

Chemical Biology – A Practical Course hat den Einsatz chemischer Techniken zur Analyse biologischer Prozesse zum Gegenstand und behandelt unterschiedliche Aspekte aus diesem Gebiet. Dazu gehört die Synthese und Hybridisierung von Desoxyoligonucleotiden, Peptidnucleinsäuren und eines DNA-Streptavidin-Konjugats, die Festphasensynthese eines Peptidhormons und dessen Wirkung auf den Calciumionenhaushalt einer kultivierten Zelllinie sowie das computergestützte Design von Proteinliganden. Weitere Kapitel widmen sich etwa der Synthese und Untersuchung lipidierter Peptide, den Prinzipien der kombinatorischen und Festphasensynthese oder der massenspektrometrischen Proteomanalyse am Beispiel der

Hefe. Einem einleitenden Kapitel, das dem Leser anhand einiger Fallstudien einen Überblick und ersten Eindruck von der Chemischen Biologie verschafft, folgen zwölf einzelne experimentelle Kapitel, die unabhängig voneinander gelesen werden können.

Die Kapitel sind einheitlich aufgebaut, wobei auf eine kurzgehaltene Einleitung jeweils eine Aufzählung der Lernziele folgt und dann eine ausführliche, durchgängig gut verständliche Darstellung der theoretischen Grundlagen. Es schließt sich jeweils eine ausführliche Arbeitsvorschrift für die Durchführung des entsprechenden Experimentes an. Der Leser kann die im theoretischen Teil behandelten Fragestellungen in praktischen Versuchen umsetzen und gewinnt dadurch einen tieferen Einblick in die Thematik. Hiermit wird das Buch dem zweiten im Titel genannten Schwerpunkt gerecht, indem es sein besonderes Augenmerk auf die Vorstellung grundlegender Arbeitstechniken in der Chemischen Biologie lenkt. Die Arbeitsvorschriften machen etwa ein Drittel des Buchumfanges aus. Dieser Teil ist auch dann mit Gewinn zu lesen, wenn keine Möglichkeit zur Durchführung der vorgestellten Versuche besteht. Anhand der Literaturangaben zu jedem Kapitel kann der interessierte Leser den behandelten Stoff weiter vertiefen. Der Anhang des Buches enthält neben einem umfangreichen Stichwortregister auch die Gefahrstoffbeschreibungen der verwendeten Chemikalien und Reagentien.

Inhaltlich ist das Buch auf dem neuesten Stand, und es ist angenehm zu lesen. Als Zielgruppe mögen sich Leser angesprochen fühlen, die sich an ausgewählten Beispielen einen Überblick über den Einsatz organisch-chemischer Techniken in der Biochemie verschaffen wollen. Die Stärke des Buches ist es, konkrete Einzelheiten zu Arbeitstechniken und aktuelle Forschung gleichermaßen

zu präsentieren. Es soll nicht verschwiegen werden, dass das Buch an vielen Stellen grundlegende Kenntnisse der Organischen Chemie und der Biochemie voraussetzt, was bei einem interdisziplinären Projekt dieser Art weder vermeidbar noch zu beanstanden ist. Diplomanden und Doktoranden, die sich mit Chemischer Biologie beschäftigen, aber auch Studenten im Hauptstudium werden dieses Buch sicher mit Gewinn lesen.

Henning Breyhan, Thomas Kolter
Kekulé-Institut für Organische Chemie und Biochemie
Universität Bonn

DOI: 10.1002/ange.200385246

Facetten einer Wissenschaft



Chemie aus ungewöhnlichen Perspektiven. Herausgegeben von Achim Müller, Hans-Jürgen Quadbeck-Seeger und Ekkehard Diekmann. Wiley-VCH, Weinheim 2003. 333 S., Broschur, 29.90 €.—ISBN 3-527-31057-6

Facetten einer Wissenschaft ist eine Sammlung von Aufsätzen zu unterschiedlichen Themen aus den Naturwissenschaften mit Schwerpunkt Chemie, eben – wie im Titel angekündigt – „Chemie aus ungewöhnlichen Perspektiven“. Der Bogen ist sehr weit gespannt: von der gesellschaftlichen Verankerung und Rechtfertigung wissen-

schaftlicher Grundlagenforschung über naturwissenschaftliche Aspekte im Werk von Thomas Mann bis hin zu anorganischen Kristallisationsvorgängen und der Bedeutung von Zink für viele Lebensprozesse. Besonders herauszuheben sind faszinierende Beiträge zur Chiralität mit vielen Beispielen für Spiegelsymmetrie in der Natur, zur Entstehung und zu den Auswirkungen von Gendefekten sowie zur menschlichen Seele aus medizinisch-naturwissenschaftlicher Sicht.

Immer wieder wird in den Aufsätzen deutlich, dass ein enger Zusammenhang zwischen den Einzeldisziplinen der Chemie besteht und dass die Chemie in viele andere Naturwissenschaften hineinreicht, getreu Lichtenberg: „*Wer nichts außer Chemie versteht, versteht auch die nicht recht.*“

Eine Besprechung der einzelnen Kapitel wäre an dieser Stelle zu umfangreich. Ebenso erübrigt es sich, die Autoren und Herausgeber vorzustellen – allein die Namen sprechen Bände. Alle Beiträge sind sehr anschaulich gehalten und mit zahlreichen, oft popularisierenden Illustrationen versehen. Der Band wurde von den Herausgebern bewusst heterogen gehalten, von Kapitel zu Kapitel muss man sich auf einen neuen Blickwinkel einstellen, aber auch oft auf einen durchaus anderen Präsentationsstil. Es ist eine Geschmacksfrage, ob man dies als Stärke oder als kleines Manko empfindet. Zusammenfassend ist dieses bunte Panoptikum jedem zu empfehlen, der sich für Zusammenhänge rund um die Chemie interessiert.

Holger Frey
Institut für Organische Chemie
Johannes Gutenberg-Universität
Mainz