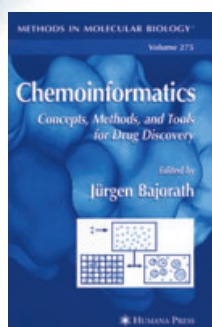




Chemoinformatics



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 gefächerter 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.

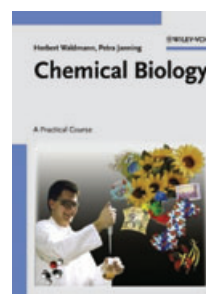
In jedem Fall hat mich das Buch von der ersten Seite an gefesselt, und ich möchte es jedem empfehlen, der auf dem Gebiet der Chemie- oder Bioinformatik arbeitet. Ohne selbst den Anspruch zu haben, ein Lehrbuch zu sein, ist es eine sinnvolle Ergänzung zu den wenigen bereits auf dem Markt befindlichen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

Gisbert Schneider

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

DOI: 10.1002/ange.200485225

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