

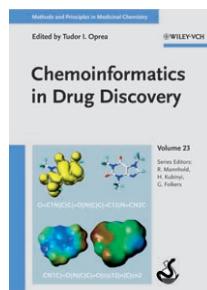
den vorangehenden Kapiteln vorgestellten Komplexe beschrieben. Zusammen mit den drei Anhängen, die eine detaillierte theoretische Betrachtung der Polarisation der d-Orbitale durch deren Kombination mit Metall-s- und Metall-p-Orbitalen, Energiewerte der d-Orbitale und eine ausführliche Diskussion der π -Acceptoreigenschaften des CO-Liganden enthalten, ist dieses Kapitel sehr gut für Leser geeignet, die einen tieferen Einblick in die theoretischen Grundlagen erhalten wollen.

Gerade für ein Lehrbuch sollte es allerdings selbstverständlich sein, dass die Formelschreibweise den IUPAC-Empfehlungen folgt und der Mesomeriepfeil (\leftrightarrow) korrekt verwendet wird (nicht so in einigen Abbildungen in Kapitel 3). Außerdem sind in mehreren Korrelationsdiagrammen Orbitale fehlerhaft dargestellt und bezeichnet (z.B. in den Abbildungen 2.9, 3.2, 3.5, 3.6, 3.7, 3.9, 4.6 und 4.11). Dies sind zwar nur geringe Mängel, sollten aber in einer künftigen Ausgabe behoben werden.

Das vorliegende Buch ist eine hervorragende Ergänzung zu dem bereits erschienenen Lehrbuch des gleichen Autors über Orbitale organischer Moleküle. Das didaktische Ziel, Studierenden eine theoretische, auf einfachen Phänomenen wie Symmetrie und Überlappung basierende Analysemethode an die Hand zu geben, die sich auf Fragen unterschiedlicher Komplexität anwenden lässt, wurde vollauf erreicht. Den treffenden Worten Roald Hoffmanns im Vorwort des Buchs: „*these chemists of the future will use the knowledge gained here to enlarge our experience with new organometallic molecules subverting once again the arbitrary division of organic and inorganic chemistry*“ ist nichts hinzufügen.

Evamarie Hey-Hawkins
Institut für Anorganische Chemie
Universität Leipzig

Chemoinformatics in Drug Discovery



Methods and Principles in Medicinal Chemistry (Band 23). Herausgegeben von Tudor I. Oprea. Wiley-VCH, Weinheim 2005. 494 S., geb., 157.50 €.—ISBN 3-527-30753-2

In der Reihe *Methods and Principles in Medical Chemistry* ist der neue Band *Chemoinformatics in Drug Discovery* mit Tudor Oprea als Herausgeber erschienen. Das Buch verschafft einen Überblick über den gegenwärtigen Stand der rationalen Wirkstoffentwicklung („drug design“) mit chemoinformatischen Methoden und weist zahlreiche namhafte Experten aus Industrie und Hochschule als Autoren aus. Beschrieben wird, welche Computermethoden sich für welche Aufgabenstellung in der Wirkstoffentwicklung eignen, was damit erreicht werden kann und wie man in der Praxis bestimmten Problemen begegnet.

Die Beiträge vermitteln dem Leser, wie fast jeder Schritt im Prozessablauf „Treffer-Identifikation → Erzeugung der Leitstruktur → Leitstrukturoptimierung → Aufstellung von Wirkstoffkandidaten“ durch verschiedenste Chemoinformatik-Anwendungen unterstützt, optimiert und beschleunigt werden kann, vom Verbindungsdatenbank-Management bis zu zielgerichteten kombinatorischen Synthesen, virtuellem Screening und dem Hit/Leitstruktur-Übergang. Dabei wird deutlich aufgezeigt – und das nicht nur aus der Sicht von Software-Entwicklern –, wie Computerprogramme zur Lösung praxisrelevanter Aufgaben angewendet werden. Die beschriebenen Lösungsstrategien gelten zugleich für häufig auftretende Probleme in der Chemoinformatik.

Das Buch ist in vier Teile gegliedert und umfasst Themen wie virtuelles Screening, Hit- und Leitstrukturmitt-

lung, Datenbanken bis hin zu Anwendungen in der Chemoinformatik. Nach einem einleitenden Überblick über vier Jahrzehnte Chemoinformatik in der pharmazeutischen Forschung und Entwicklung (G. Marshall) folgt der erste Buchteil mit den Schwerpunktthemen virtuelles Screening und Leitstrukturdarstellung. T. Oprea, A. R. Leach, M. Rarey und D. Horvath beschreiben hier den Einsatz der Chemoinformatik und Computerchemie, einschließlich Anwendungen von Algorithmen und pharmakophorbasierten virtuellen Screenings.

Im zweiten Teil des Buches wird die Hit- und Leitstruktursuche durch In-silico-Techniken behandelt. I. McFadden, C. L. Cavallaro, C. M. W. Ho und andere Autoren schildern Möglichkeiten zur Verbesserung der Qualität und Diversität von Treffern in Hochdurchsatzverfahren sowie Ansätze zur Leitstrukturoptimierung. D. Weiniger, J. Sadowski unter andere Autoren besprechen im dritten Teil Datenbeschaffung und „Data-Mining“ in Datenbanken. Aufgeführt werden Bibliotheken wie WOMBAT, Cabinet und deren Inhalte, z.B. Modifikationen von Strukturen und rationales Design kombinatorischer Bibliotheken. Der umfangreichste, vierte Teil des Buches behandelt spezielle Anwendungen und Beispiele. Autoren wie K. H. Baringhaus, G. M. Maggiola, R. A. Goodnow, A. Tropsha und D. J. Abraham erläutern darin Strategien zu Prozessen wie Leitstrukturoptimierung, Bibliotheks-Design, Wirkstoffentwicklung oder Database-Mining.

Chemoinformatics in Drug Discovery ist eine hochwertige Quelle für Anwender aus allen Bereichen der pharmazeutischen Forschung und medizinischen Chemie in Forschung und Industrie.

Thomas Engel
Köln

DOI: 10.1002/ange.200585342