

gelingen. Bedauerlich ist auch, daß Wagnière nicht angibt, wie aus graphischen Darstellungen Gleichungen abgeleitet werden können – Analogien haben ihre Grenze. Von wenigen Ausnahmen abgesehen ist dem Autor jedoch ein ausgewogenes Verhältnis zwischen dem im Grundlagentext und in den Anhängen dargestellten Stoff gelungen.

Der Leser sollte sich auch darüber im klaren sein, wovon dieses Buch *nicht* handelt. Es geht weder um spezielle Moleküle noch um Anwendungen, sondern um *Phänomene*. Im großen und ganzen tauchen Moleküle im Buch nur über ihre Symmetrieeigenschaften auf, und Anwendungsbeispiele dienen ausschließlich zur Veranschaulichung. Über die praktische Anwendung von Molekülen in der nichtlinearen Optik kann sich der Leser in „Nonlinear Optical Properties of Molecules and Crystals“ von Zyss und Chemla, in „Introduction to Nonlinear Optical Effects in Molecules and Polymers“ von Prasad und Williams oder in den zahlreichen Übersichtsartikeln zu diesem Thema informieren – aber lesen Sie Wagnières Buch zuerst! Ebenso ist „Introduction to Nonlinear Laser Spectroscopy“ von Levinson und Kano eine empfehlenswerte Lektüre für Molekülspektroskopiker.

„Linear and Nonlinear Optical Properties of Molecules“ ist vergleichsweise preiswert und sollte bei jedem im Bücherregal stehen, der auf dem Gebiet der nichtlinearen Optik oder der Molekülspektroskopie von kondensierten Phasen arbeitet. Für Studenten ist das Buch als erste Orientierung über das Thema vielleicht weniger geeignet; wenn es später jedoch gilt, sich eine Systematik zur Erklärung und zum Verständnis optischer Effekte in Molekülen zu verschaffen, ist es von unschätzbarem Wert. Die Anhänge enthalten eine Fülle wertvoller Formeln und Beziehungen und werden sogar dem in der linearen Optik erfahrenen Praktiker von Nutzen sein.

Colin Bain
Physical Chemistry Laboratory
Oxford University
Oxford (Großbritannien)

Three-Dimensional Chemical Similarity Searching. (Reihe: Research Studies Press.) Von C. Pepperrell. Wiley, Chichester, 1994. 304 S., geb. 57.50 £. – ISBN 0-86380-145-5

Seit mehr als einem Jahrhundert verwenden Chemiker zweidimensionale Strukturformeln, um chemische Informationen festzuhalten. Diese Darstellungsart

war bisher auch für die computergestützte Speicherung, Bearbeitung und Abfrage von Strukturdaten die wichtigste. Alleine die Datenbank der *Chemical Abstracts* umfaßt mehr als zehn Millionen solcher Strukturformeln. Obwohl sich diese Darstellungsweise bisher als sehr nützlich erwiesen hat, stellt sich heute die Frage, ob sie sich nicht überlebt hat. Zweidimensionale Formeln sind nämlich für die Computerspeicherung ziemlich ungeeignet, denn sie müssen im gleichen Format und mit der gleichen Orientierung gezeichnet werden, damit ein Strukturvergleich überhaupt möglich ist. Der Vergleich von Strukturen und die Beurteilung ihrer Ähnlichkeit ist im vergangenen Jahrzehnt sehr wichtig geworden, nachdem man erkannt hatte, daß solche Untersuchungen im Frühstadium des Moleküldesigns nützlich sein können. Dies gilt besonders für die Planung neuer Pharmaca und Agrochemikalien. Außerdem ist die Bestimmung der Stereochemie oder der Chiralität von Molekülen für viele aktuelle Fragen der Chemie wichtig. Es überrascht daher kaum, daß Chemiker sich nun mit Nachdruck mit der dreidimensionalen Darstellung von Molekülen befassen.

Das vorliegende Buch ist ein wichtiger und innovativer Schritt in diese Richtung. Es stammt von der Informationsstudien-gruppe der Universität Sheffield, die nachweislich weltweit bei der Entwicklung neuer Ansätze zur Handhabung dreidimensionaler Strukturdaten am aktivsten ist. Die Autorin konzentriert sich auf die Techniken zur Abfrage dreidimensionaler Strukturen aus Datenbanken, wobei der Schwerpunkt auf der Suche nach Ähnlichkeiten liegt. Nachdem sie die Beschränkungen der zweidimensionalen Suche hervorgehoben hat, analysiert die Autorin die Einsatzmöglichkeiten und Effizienz von vier dreidimensionalen Ähnlichkeitsmethoden, nämlich der Distanzverteilungsmethode, der Verwendung individueller Abstände, der Atomabbildungsmethode und der Methode der größten gemeinsamen Teilstruktur. Sie kommt zum Schluß, daß insgesamt die Atomabbildungsmethode die beste ist. Dieses Verfahren beruht auf einer lokalisierten Beschreibung der dreidimensionalen Umgebung jedes Atoms in einem Molekül. Beim Vergleich zweier Moleküle werden Atome mit ähnlicher lokaler Umgebung aufeinander abgebildet, und die Ähnlichkeiten zwischen den so abgebildeten Atomen werden zu einem globalen Maß für die Ähnlichkeit der beiden Moleküle kombiniert. Der Rest des Buchs, einschließlich eines 30seitigen Anhangs mit Anwendungsbeispielen, ist der Diskussion der Atomabbildungsmethode gewid-

met. Unter anderem betrachtet die Autorin Wege zur Optimierung der Methode, zu ihrer Beschleunigung, und sie erweitert Ziele und Anwendungsgebiete der Methode. In der Tat kann das Verfahren mit entsprechenden Anpassungen nicht nur auf relativ kleine Moleküle, sondern auch auf Makromoleküle angewendet werden.

Mit der Vorstellung dieses ganzen Stoffs in einem Band erweist die Autorin Chemikern aus vielen Gebieten der Chemie einen großen Dienst. Die Suche nach Strukturen ist heute die häufigste Abfrageart bei chemischen Datenbanken, und die Nachfrage wird in Zukunft vermutlich deutlich zunehmen. Das vorliegende Buch behandelt nicht nur das immer dringlichere Problem der Speicherung und Bearbeitung von dreidimensionalen Daten, sondern zeigt auch, wie Ähnlichkeitsbegriffe erfolgreich für die Suche nach solchen Daten benutzt werden können. Obwohl die Methode in ihrer derzeitigen Form die Datenflut sehr großer Datenbanken nicht bewältigen kann, ist sie doch für mittelgroße Datenbanken mit bis zu 50000 Strukturen geeignet. Außerdem werden neue Entwicklungen, an denen zur Zeit gearbeitet wird, diese Grenze in naher Zukunft zweifellos deutlich hinausschieben. Die Atomabbildungsmethode hat viele Anwendungsmöglichkeiten und wird vor allem im Bereich des Moleküldesigns eingesetzt werden. Der Autorin gebührt Dank dafür, daß sie einen so nützlichen und bündigen Führer zu diesem sich rasch veränderndem Gebiet geschrieben hat.

Dennis H. Rouvray
University of Georgia
Athens, GA (USA)

Structure and Properties of Polymers. (Reihe: Materials Science and Technology, Vol. 12.) Herausgegeben von E. L. Thomas. VCH Verlagsgesellschaft, Weinheim/VCH Publishers, New York, 1993. 786 S., geb. 430.00 DM/325.00 \$. – ISBN 3-527-26825-1/0-89573-700-0

Der vorliegende Band ist Teil einer Serie, die ein breites Spektrum der Materialwissenschaften abdeckt. Die Serie ist als Nachschlagewerk sowie zum systematischen Studieren gedacht. Dabei soll jedes Kapitel so umfangreich sein, daß es ausführlicher als eine Enzyklopädie, jedoch kompakter als eine Monographie ist. Die Serie ist an eine breite Leserschicht gerichtet und eignet sich auch, um sich einen Überblick über neuere Entwicklungen auf einem Nachbargebiet zu verschaffen.