

er sich Präparate des kristallisierten Chlorophylls von Willstätter auslieh. Es gelang Fischer, die Kollegen und Behörden davon zu überzeugen, dass Willstätter die herausragende Persönlichkeit war, um die Organische Chemie im Rahmen des neuen KWI zu vertreten. Das Berufungsverfahren geriet ins Stocken, als Willstätter im Juli 1911 – hier fehlen zwei Briefe – abrupt auf die angebotene Stellung verzichtete. Geschickt blenden die Herausgeber hier Briefe (E1–E9) von Fischer an Beckmann, Haber und Duisberg sowie deren Antworten ein. Fritz Haber erkannte, dass Willstätter nicht als Subdirektor unter Ernst Beckmann, der schon 1910 als Direktor des KWI vorgeschlagen war, dienen mochte. Um Willstätter eine staatliche Pension anbieten zu können, hatte man ihm ein Extraordinariat an der Berliner Universität offeriert. Habers diplomatisches Geschick leitete die Lösung des Knotens ein: Freie Forschertätigkeit am KWI und ordentlicher Honorarprofessor ohne Lehrverpflichtung an der Universität. Willstätter willigte ein und siedelte Ende 1912 nach Fertigstellung des Institutsgebäudes um.

Im Januar 1915 erbat Willstätter die Erlaubnis von Fischer, ihn für seine Arbeiten über Aminosäuren, Polypeptide und Proteine für einen zweiten Nobelpreis vorschlagen zu dürfen (Briefe Nr. 34, 37, 38); den ersten hatte Fischer 1902 für die Pionierarbeiten über Zucker und Purine erhalten. Fischer führte gewichtige Gründe gegen eine zweite Nominierung an. Der Nobelpreis 1915 ging – an Willstätter für seine Untersuchungen über Pflanzenfarbstoffe.

Im Jahr 1916 übersiedelte Willstätter als Nachfolger A. von Baeyers nach München; keine Briefe sind erhalten von den eventuellen Bemühungen, Willstätter in Berlin-Dahlem zu halten. Im August 1917 verstarb A. von Baeyer im Alter von 82 Jahren. Die Briefe 41–44 galten der Veranstaltung einer würdigen Gedenkfeier, der Abfassung des Nachrufs sowie der Aufstellung eines Denkmals und dessen Finanzierung. Anmerkung des Rezessenten: Das von H. Hahn geschaffene Baeyer-Denkmal wurde 1922 vor dem von Willstätter aufgeführten Erweiterungsbau des Chemischen Laboratoriums der Bayerischen Akademie der Wissenschaften, wie es damals hieß, aufgestellt und überlebte

die Kriegszerstörung des Laboratoriums. Heute befindet es sich vor dem Haus F der neuen Gebäude des Departments Chemie der Ludwig-Maximilians-Universität in München-Großhadern.

Der letzte Briefaustausch (Nr. 46, 47), in das Jahr 1918 fallend, galt der Aufrechterhaltung des Niveaus von Liebigs Annalen der Chemie sowie der Schaffung einer Gesellschaft für die Förderung des Chemischen Unterrichts.

Das Blühen wissenschaftlicher Forschung erfordert einen festen äußeren Rahmen, der so elastisch sein musste, dass er auch in Kriegszeiten nicht zerbrach. Die faszinierende Lektüre dieses Briefwechsels vermittelt wenig von den Forschungsergebnissen, umso mehr aber vom Leben der handelnden Personen und den Bedingungen ihres Wirkens. Aus heutiger Sicht mag erstaunen, dass trotz gelegentlicher Nähe der Arbeitsgebiete der Gedanke einer Kooperation nicht aufkam. Die Abgrenzung von Interessensphären war von größerer Wichtigkeit in der Zeit der großen Einzelpersönlichkeiten.

Die Herausgeber verdienen Dank für die sorgfältige Edierung der Briefe, die in diesem Büchlein einer breiteren Öffentlichkeit zugänglich gemacht werden.

Rolf Huisgen
Department Chemie
der Universität München

Bioinformatik. Von Reinhard Rauhut. Wiley-VCH, Weinheim 2001. 286 S., Broschur 69.00 €.—ISBN 3-527-30355-3

„Genomprojekte, die enorm fortgeschrittenen Techniken der Strukturaufklärung biologischer Makromoleküle, die Erstellung komplexer Datensätze mit Chiptechnologien führen seit den 90er Jahren zu einer immer rasanteren Zunahme des biologischen Wissens. Allein die bloße Menge existierender Daten machte spezielle Methoden zu ihrer Erschließung nötig. Entdeckungen sind heute möglich, indem man die bereits existierenden Datenmengen genau analysiert.“ schreibt Reinhard Rauhut in der Einleitung zu seinem Buch *Bioinformatik, Sequenz-Struktur-Funktion*. Es richtet sich in erster Linie an die expe-

rimentell arbeitenden Biologen und Biochemiker im Labor. Die Bioinformatik wird in sieben Abschnitten behandelt: Sequenzen, Strukturen, Genomics, Functional Genomics, Proteomics, Phylogenetik und DNA-Computing, wobei die ersten beiden Abschnitte den größten Raum einnehmen. Insgesamt verzichtet der Autor auf detaillierte, komplexe Erklärungen der zugrunde liegenden Mathematik. Vielmehr beschränken sich die mathematischen Ausführungen auf die Erläuterung der grundsätzlichen Konzepte, wo sie für das Verständnis der verwendeten Software notwendig sind. Rauhut verzichtet ebenso auf eine Anleitung zur Bedienung der verschiedenen Softwarepakete, da er davon ausgeht, dass umfassende Dokumentationen darüber im Internet erhältlich sind.

Im ersten und zugleich umfangreichsten Kapitel „Sequenzen“ werden zuerst verschiedene öffentliche Sequenzdatenbanken für DNA- und Proteinsequenzen vorgestellt. Ein Schwerpunkt liegt auf der Beschreibung von Alignments, also dem Vergleich verschiedener Sequenzen und der Ermittlung ihrer Ähnlichkeit. Dieses Thema verdient besondere Aufmerksamkeit, da Alignments die Grundlage von Programmen wie BLAST sind, mit denen Sequenzdatenbanken nach identischen oder ähnlichen Sequenzen zu einer gegebenen Sequenz durchsucht werden können. Die Erklärung der zugrunde liegenden Algorithmen wird insbesondere dem durchschnittlichen Anwender, der sich bislang nicht um die mathematischen Grundlagen geschart hat, zahlreiche neue Einsichten liefern. Im folgenden Abschnitt wird die Anwendung der BLAST-Programme genauer besprochen. Wer bislang nur die Standardfunktionen dieser Programme genutzt hat, findet eine Fülle wertvoller Hinweise zu den zahlreichen Programmoptionen und -optionen, die eine wesentlich bessere Erfolgsquote bei der Datenbanksuche ermöglichen.

Mit der Anwendung von Markov-Modellen zur Identifizierung von Genen und als Methode zur Erstellung multipler Alignments unter Berücksichtigung von Proteinstrukturen wird der Übergang zum zweiten Kapitel „Strukturen“ geschaffen. Ausgehend von den Grundlagen der Proteinfaltung werden verschiedene Systeme zur Strukturvorher sage von Proteinen und RNA sowie die

Strukturdatenbank PDB vorgestellt. Mit der Klassifizierung von Proteinen nicht aufgrund ihrer ähnlichen Sequenzen sondern aufgrund ihrer strukturellen Ähnlichkeit und dem damit verbundenen Zusammenhang zwischen Sequenz, Struktur und Funktion endet das Kapitel.

Im Verhältnis zu den ersten beiden Kapiteln fallen die drei folgenden Kapitel „Genomics“, „Functional Genomics“ und „Proteomics“ deutlich weniger umfangreich aus. Rauhut schneidet zahlreiche aktuelle Themen wie die vergleichende Genomanalyse, Techniken der Genomsequenzierung, die Anwendung der DNA-Chiptechnologie, die Analyse von Einzelbasenaustauschen (SNPs, „single nucleotide polymorphisms“), moderne Methoden der Proteinsequenzierung oder „Pathway“-Datenbanken an. Während jedoch aus den ersten beiden Kapitel sofort einsetzbare praktische Erkenntnisse für die Arbeit mit Sequenzdatenbanken gewonnen werden können, beschränken sich die übrigen Kapitel darauf, thematische Einführungen zu geben. Deren Wert liegt in der Präsentation verschiedener Techniken samt ihrer Möglichkeiten und Beschränkungen, aus der Impulse für die eigene Versuchsgestaltung ausgehen können. Wie in den übrigen Kapiteln wird auch hier auf weiterführende Informationen in Publikationen und im Internet verwiesen.

Insgesamt bietet das Buch eine schöne Übersicht über die Bioinformatik, ohne zu sehr in die mathematischen Tiefen zu dringen. Die Ausführungen über Strukturen von Proteinen und RNA und insbesondere die Strukturvorhersagen gehen meines Erachtens zu sehr ins Detail. Die Strukturvorhersage ist nach wie vor unausgereift und für den durchschnittlichen Anwender im Labor sicherlich kein geeignetes Werkzeug für die beiläufige Beschäftigung. Ebenso erfordern die recht ausführlich beschriebenen Verfahren, mit deren Hilfe strukturelle Ähnlichkeiten verschiedener Proteine analysiert werden können, ein hohes Maß an Fachwissen. Andererseits werden trotz der gewünschten Nähe zur Anwendung mehrere häufig auftretende Fragestellungen nicht angesprochen, z.B. wie mit EST-Datenbanken RNA-Splicing oder komplett cDNA-Bereiche entdeckt werden können oder wie

durch die Kombination verschiedener Datenbanksuchen der genomicsche Kontext einer experimentell ermittelten unbekannten Sequenz aufgeklärt werden kann.

Das kurze Kapitel über Phylogenetik beschränkt sich auf die Analyse der Verwandtschaft von Genen und Organismen. Gänzlich unerwähnt bleiben moderne mathematische Instrumente wie Netzwerkmethoden in der immer mehr an Bedeutung gewinnenden Populationsgenetik. Dazu Rauhut in seinem Vorwort: „Perfekte Lehrbücher entstehen nicht in der ersten Auflage, sie wachsen vielmehr durch das Feedback der Leser.“ So ist diese erste Ausgabe zwar noch nicht perfekt, aber schon sehr lesewert.

Martin Forster

Heinrich-Pette-Institut, Hamburg

Kurzlehrbuch Physikalische Chemie. 3. Auflage. Von Peter W. Atkins. Übersetzt von R. Ludwig, A. Appelhagen und F. Schmauder. Wiley-VCH, Weinheim 2001. 859 S., geb. 55.00 €.—ISBN 3-527-30433-9

Das Kurzlehrbuch der Physikalischen Chemie von Peter Atkins liegt nun in einer dritten, völlig überarbeiteten deutschen Auflage vor.

Als Zielgruppe hat der Autor Leser im Visier, „die ein Kompendium der wesentlichen Gesichtspunkte dieses Schlüsselbereiches der Chemie benötigen, oder deren Interessen im Umweltschutz, der chemischen Verfahrenstechnik oder auf anderen benachbarten Feldern liegen“. Damit wären Ingenieure und Studierende mit Physikalischer Chemie als Nebenfach angeprochen, aber auch Studienanfänger der Chemie.

Das Buch ist in 21 Kapitel gegliedert und bietet den Stoff im Wesentlichen in der traditionellen Reihenfolge: Nach einer kurzen Einführung zu Aggregatzuständen und Zustandsvariablen werden die Eigenschaften idealer und realer Gase erörtert. Die folgenden Kapitel

behandeln den ersten Hauptsatz der Thermodynamik, die Thermochemie chemischer Reaktionen, den zweiten Hauptsatz, Phasengleichgewichte reiner Substanzen und die Eigenschaften von Mischungen. Zwei weitere Kapitel sind dem chemischen Gleichgewicht gewidmet, das nächste der Elektrochemie im chemischen Gleichgewicht. Der klassische Teil schließt mit je einem Kapitel über chemische Kinetik und zur Interpretation von Geschwindigkeitsgesetzen. In der zweiten Hälfte des Buches sind die Themen zusammengefasst, die nur auf der Grundlage der Quantentheorie verstanden werden können. Folgerichtig wird mit einer kurzen Einführung in die Quantentheorie begonnen, der sich Ausführungen über den Aufbau der Atome anschließen. Die kovalente chemische Bindung wird sowohl im VB- als auch im MO-Ansatz besprochen. Für Festkörper werden die Bändertheorie und Ionenbindung als Grenzfälle dargestellt. Hier findet sich auch ein Unterkapitel über die Symmetrie der Raumgruppen. Ein weiteres Kapitel behandelt die zwischenmolekularen Kräfte mit ausführlicher Berücksichtigung von Biopolymeren, Mesophasen und dispersen Systemen. Es schließen sich drei Kapitel zur Molekülspektroskopie an, worin zunächst die Rotations- und Schwingungsspektroskopie, dann die Spektroskopie elektronischer Übergänge und schließlich die magnetische Resonanz besprochen werden. Das letzte Kapitel zur statistischen Thermodynamik zeigt auf, dass letztlich auch die im ersten Teil makroskopisch beschriebenen Größen auf der Grundlage der Quantennatur der Materie verstanden werden können.

Jedes Kapitel enthält ein oder zwei Exkurse, in denen Anwendungen des gerade Besprochenen an konkreten Beispielen demonstriert werden. Diese Beispiele betreffen in erster Linie biologische Fragestellungen. In den Exkursen und am Ende jedes Kapitels werden Übungsaufgaben gestellt, deren Ergebnisse (aber nicht der Lösungsweg) am Ende des Buches aufgelistet werden. Das Buch wird abgeschlossen mit 10 Zusatzinformationen, in denen die Beschreibung mathematischer Methoden (Differenzieren, Integrieren) sowie grundlegender physikalischer Gesetzmäßigkeiten (Coulomb-Gesetz etc.) erfolgt, einigen Tabellen mit thermodynamischen Daten und einer ausführlichen Literaturangabe.

