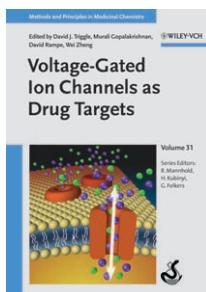


## Voltage-Gated Ion Channels as Drug Targets



Methods and Principles in Medicinal Chemistry (Bd. 31). Herausgegeben von David J. Triggle, Murali Gopalakrishnan, David Rampe und Wei Zheng. Wiley-VCH, Weinheim 2006. 480 S., geb., 149.00 €.— ISBN 3-527-31258-7

Ionenkanäle zählen in der medizinischen Chemie zu den wichtigsten Wirkorten (targets) für Medikamente. Nifedipin, Diltiazem und Verapamil gehören zu den bekanntesten Beispielen für Wirkstoffe, die Calcium-Kanäle beeinflussen und zur Behandlung von Bluthochdruck und Angina Pectoris genutzt werden.

Das vorliegende Buch gibt in acht Kapiteln aus der Feder renommierter Experten eine umfassende Übersicht zu spannungsgesteuerten Ionenkanälen sowie zu Wirkstoffen, die diese Ionenkanäle beeinflussen. Nach einer allgemeinen Einleitung zu membranständigen Ionenkanälen (Kapitel 1) befasst sich W. A. Catterall in Kapitel 2 mit der großen Familie der spannungsgesteuerten Ionenkanäle. Kapitel 3 von S. I. McDonough und B. P. Bean behandelt die Interaktion von Wirkstoffen mit Ionenkanälen in Abhängigkeit von den Stadien der Ionenkanäle und gibt dem Leser einen Einblick in die biochemische Funktionsweise dieser Molekülklasse. Im von D. Leishman und G. Waldron verfassten Kapitel 4 werden elektrophysiologische Methoden be-

schrieben, um Ionenkanaleigenschaften und deren Beeinflussung durch Wirkstoffe zu untersuchen, wobei der Schwerpunkt auf Patch-Clamp-Techniken liegt. Chemiker verfügen selten über Hintergrundwissen zu diesem Thema, und so ist dieses Kapitel eine gut geschriebene Einführung in das Gebiet der Ionenkanalanalytik.

Die drei folgenden Kapitel über Calcium-Kanäle (Kap. 5 von C. Doering und G. Zamponi), Natrium-Kanäle (Kap. 6 von D. S. Kraft, M. Chapman und K. McCormack) und Kalium-Kanäle (Kap. 7.1 von M. Gopalakrishnan, C.-C. Shieh und J. Chen) bilden mit zusammen 322 Seiten das Herzstück des Buchs. Hier sind Informationen zu Strukturen der Ionenkanäle, zu Kanal-Subtypen und vor allem zu bekannten Wirkstoffen zusammengestellt. Für jeden Wirkstoff werden die chemische Struktur, Bindungsspezifitäten und umfangreiche Literaturhinweise angegeben. Das achtste und letzte Kapitel, verfasst von K. Bracey und D. Wray, beschäftigt sich mit genetisch bedingten und erworbenen Krankheiten, die auf einer Fehlfunktion von Ionenkanälen beruhen.

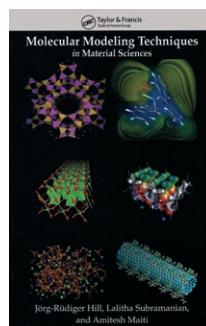
Jedes Kapitel oder Unterkapitel enthält ein umfangreiches und aktuelles Literaturverzeichnis. Ein Stichwortregister am Ende komplettiert das Buch. Die Zielgruppe des Buches sind medizinisch forschende Chemiker, die nach Informationen zu bestimmten Ionenkanälen und deren Wirkstoffen suchen. Biophysiker oder Biochemiker mit weitergehendem Interesse an Struktur und Funktion von Ionenkanälen werden zusätzliche Bücher wie das von Hille (*Ion Channels of Excitable Membranes*) zu Rate ziehen. *Voltage-Gated Ion Channels as Drug Targets* bietet jedoch auch für diesen Leserkreis einen umfassenden und aktuellen Literaturüberblick.

Das vorliegende Buch ist für jede Bibliothek eines Pharmaunternehmens unverzichtbar, kann aber auch Universitätsbibliotheken und Forschern auf dem Gebiet der Ionenkanäle empfohlen werden.

Philipp Reiß, Ulrich Koert  
Fachbereich Chemie  
Universität Marburg

DOI: 10.1002/ange.200685419

## Molecular Modeling Techniques in Material Sciences



Von Jörg-Rüdiger Hill, Lalitha Subramanian und Amitesh Maiti. CRC Press/Taylor & Francis 2005. 328 S., geb., 111.50 \$.—ISBN 0-8247-2419-4

Die Modellierung von Materialien auf molekularer Ebene hat sich in den letzten 15 Jahren zu einem wichtigen Forschungsbereich in den Materialwissenschaften entwickelt. Heutzutage bilden Simulationen neben Experimenten und Theorie die dritte Säule wissenschaftlicher Methoden in der Materialforschung. Diese Entwicklung wurde vorangetrieben von der exponentiellen Zunahme der Rechnergeschwindigkeiten, der Entwicklung von neuen, leistungsstarken Modell-Algorithmen und der entsprechenden Software sowie der Notwendigkeit, die Eigenschaften von Hightech-Materialien auf molekularer Ebene zu verstehen. *Molecular Modeling Techniques in Material Sciences* ist eine höchst willkommene Ergänzung der aktuellen Literatur zur molekularen Modellierung in den Materialwissenschaften.

Das erklärte Ziel des Buchs ist es, „einen Überblick über verbreitet angewendete Methoden für atomistische Simulationen einer großen Auswahl von Materialien zu geben und den nötigen theoretischen Hintergrund zu vermitteln, um z.B. zu verstehen, warum ein bestimmter Typ von Kraftfeld für Zeolithen geeignet, aber für Gläser ungeeignet ist. Oder warum etwa die Näherung der lokalen Dichte zur Geometrieoptimierung einer Halbleiterstruktur verwendet werden kann, nicht aber um die Bandlücke des Halbleiters zu bestimmen.“ Das Buch widmet sich gänzlich der molekularen Modellierung, einschließlich Berechnungen der Elektronenstruktur und Kraftfeldrechnungen wie Monte-Carlo- und Moleküldynamik(MD)-Methoden.