

die über Jahrzehnte sich erstreckenden Erscheinungssterne der Teilbände dieser Handbuchs eine strenge Systematik der Einteilung des Stoffes unter dem Ordnungsprinzip „Methoden zur Herstellung bestimmter organischer Verbindungen“ kaum noch aufrechtzuerhalten ist.

Die ersten 854 Seiten befassen sich mit der Herstellung der Diene, wobei unter Durchbrechung der Systematik nicht nur Kohlenwasserstoffe mit konjugierten Doppelbindungen, sondern auch Diene mit funktionellen Gruppen aufgenommen worden sind. Mit insgesamt 285 Seiten ist das Kapitel über Umwandlungen der Diene ebenfalls recht umfangreich ausgefallen, wobei allerdings berücksichtigt werden muß, daß die Diels-Aldersche Diensynthese einen besonderen Raum einnimmt.

Dieser Teilband bekommt durch die Abweichungen von der Systematik des Handbuchs sehr stark den Charakter einer Monographie und ist zweifellos für den speziell interessierten Benutzer unabhängig von den übrigen Bänden als Handbuch ohne weiteres brauchbar.

Die beschriebenen Synthesemethoden gliedern sich in solche, bei denen die konjugierten Doppelbindungen ohne Änderung des Kohlenstoffgerüstes hergestellt werden und solche, bei denen die Herstellung unter Abänderung des Kohlenstoffgerüstes erfolgt.

Es schließen sich noch ein Kapitel über die Herstellung von Dienen aus heterocyclischen Verbindungen sowie Kapitel über Reinigung, Analytik und Handhabung von Dienen an.

Im zweiten Teil finden sich folgende Kapitel: Oxidationen, Additionen ohne Neuknüpfung von Kohlenstoff-Kohlenstoff-Bindungen, Additionen unter Neuknüpfung von Kohlenstoff-Kohlenstoff-Bindungen, Cycloadditionen, photochemische Reaktionen, Dehydrierungen und Disproportionierungen, Substitutionen, Isomerisierungen, Reaktionen des Cyclopentadiens und Metallverbindungen.

Es folgt das umfangreiche Kapitel über die Diels-Alder-Reaktion. Sowohl die Herstellungsmethode als auch die Reaktionen der Diene sind in sehr übersichtlicher und systematischer Weise abgehandelt. Infolge der zahlreichen typischen und sinnvoll ausgewählten Beispiele, die durch Tabellen ergänzt werden, ist der Band von sehr hohem praktischem Wert. Ein besonderes Lob verdient das ausgezeichnete Kapitel über die Diels-Alder-Reaktion.

Abschließend läßt sich feststellen, daß dieser wohlgefundiene Teilband für alle Hochschul- und Industriechemiker eine wichtige und notwendige Ergänzung des Gesamtwerkes darstellt.

Hermann Stetter [NB 958 b]

The Theory of Adsorption and Catalysis. Physical Chemistry, A Series of Monographs. Von A. Clark. Academic Press. New York-London 1970 1. Aufl., X, 418 S., geb. DM 19.50.

Der Autor gibt in seinem Buch einen Überblick über den heutigen Stand der theoretischen Behandlung der Adsorption und der Katalyse. Es liegt in der Natur der Sache, daß im ersten, der Adsorption gewidmeten Teil auf Modellvorstellungen aufbauende Theorien im Vordergrund stehen, im zweiten Teil, der sich mit der Katalyse beschäftigt, dagegen empirisch gefundene Beziehungen.

Als Einführung dient ein kurzer Abriß der Thermodynamik der Adsorption. Ihm schließt sich die Behandlung der lokalisierten und nicht lokalisierten Adsorption auf homo-

genen und heterogenen Oberflächen für Systeme ohne Wechselwirkung zwischen benachbarten Teilchen und für Systeme mit einer solchen Wechselwirkung an. Für diese vielfältigen Adsorptionssysteme werden mit Hilfe der statistischen Thermodynamik Adsorptionsisothermen, Adsorptionswärmen, Adsorptionsentropien und dergleichen abgeleitet.

Je ein Kapitel beschäftigt sich mit den Adsorptionskräften bei der Physisorption, bei der Chemisorption an Metallen und der Chemisorption an Halbleitern. Dementsprechend werden die Dispersions- und Repulsionskräfte besprochen, ebenso die Analogie zwischen der Chemisorptionsbindung und der chemischen Bindung und die Ansätze zu einer quantenmechanischen Behandlung der Chemisorption. Für die Beschreibung der Chemisorption an Halbleitern dienen vornehmlich die Hauffeschen und die Wolkensteinschen Überlegungen. Ein Kapitel über die Kinetik der Chemisorption schließt den ersten Teil des Buches ab.

Die Betrachtung der Beziehung zwischen Adsorption und Katalyse leitet den zweiten Teil ein. Die Kinetik heterogener katalytischer Reaktionen wird getrennt betrachtet für Reaktionen, bei denen die Diffusion keine Rolle spielt, und für diffusionskontrollierte Reaktionen.

Der „geometrische Faktor“ wird eingehend am Einfluß von Gitterstruktur, Fehlstellen und Teilchengröße auf die katalytische Wirksamkeit diskutiert. Der „elektronische Faktor“ wird für Metalle und Halbleiter behandelt. Ein abschließendes Kapitel beschäftigt sich mit den adsorbierten Spezies und ihrer Rolle bei der heterogenen Katalyse.

Die reichhaltigen Literaturzusammenstellungen weisen Arbeiten bis zum Jahre 1969 auf.

Für jeden, der sich mit den Grundlagen der Adsorption und Katalyse beschäftigt, dürfte diese gelungene Zusammenfassung unseres heutigen Wissens eine willkommene Hilfe sein.

Gerd Wedler [NB 951]

Computer Programs for Chemistry. Von D.F. Detar. W.A. Benjamin Inc. New York 1968. 1. Aufl., XX, 207 S., geb. \$ 14.75.

Die Auswertung von Meßergebnissen oder die Berechnung von Moleküleigenschaften mit Hilfe von Computer-Programmen gewinnt in der Chemie zunehmend an Bedeutung. Sobald den Überlegungen ein komplizierter Rechengang zugrunde liegt, ist es ratsam, hierfür Programme zu verwenden, die von einem Personenkreis geschaffen wurden, der sich mit programmtechnischen Problemen vertraut gemacht hat.

Der Zweck der „Computer Programs for Chemistry“ ist es, Programme bereitzustellen, die zur Lösung gewisser chemischer Probleme direkt verwendet werden können oder die sich nach geringfügigen Änderungen in andere Programme einbauen lassen. Der vorliegende erste Band enthält FORTRAN-IV-Programme mehrerer Autoren aus dem Bereich der NMR-Spektroskopie und der Kinetik sowie ein Programm zum Aufzeichnen von Kurven (PLOTLN). LAOCN 3 und die Programme NMRIT, NMREN berechnen aus angenommenen chemischen Verschiebungen und Kopplungskonstanten die Lage und die Intensität der NMR-Linien. Ist das berechnete dem experimentellen Spektrum ähnlich, so können die Ein-

gabeparameter in Iterationsverfahren verbessert werden. LSG oder LSKIN1 wertet die Daten einer Reaktion 1. Ordnung aus und berechnet den besten Wert für die Geschwindigkeitskonstante sowie den Anfangs- und Endwert der Variablen.

Alle Programme sind als verkleinerte photomechanische Wiedergaben der Originalprogramme aufgenommen worden, und jedes Programm ist mit der Ein- und Ausgabe eines Beispiels versehen. Außer einer Ein- und Ausgabeverlängerung wird zu jedem Programm eine Beschreibung gegeben. Ein wichtiger Teil dieser ist jeweils das Kapitel "Structure of the Program", das dem Leser die Möglichkeit der Programmanalyse gibt. Während dieser Teil der Programmbeschreibung bei LAOCN3 ausgezeichnet gelungen ist, ist er bei den übrigen Programmen zu kurz geraten. Alle Programme wurden von anderer Seite geprüft, so daß Fehler nur formaler Natur sind. So muß es auf Seite 22 heißen "last two cards are blank". Desgleichen fehlt auf Seite 24 auf der rechten Hälfte zwischen den Datensätzen eine Leerkarte. Die Variable ISUM (S. 29) ist gleich der Anzahl der um 1 vermehrten β -Spins.

Alle Programme können auf einem Programmband käuflich erworben werden, die Listen und Karten waren bisher auch vom Quantum Chemistry Program Exchange (QCPE), Indiana University, Bloomington erhältlich. Aber selbst ein Ablochen der Programmisten steht in punkto Zeitaufwand in keinem Verhältnis zu einer Neuprogrammierung, ganz abgesehen von dem didaktischen Wert, den eine gelungene Programmanalyse für den Benutzer mit sich bringt.

Günter Ege [NB 949]

Phase Equilibria, Basic Principles, Applications, Experimental Techniques. Von A. Reisman. Academic Press, New York-London 1970. XI, 541 S., geb. \$ 27.50.

Bis zur Mitte der fünfziger Jahre interessierten Phasengleichgewichte fast ausschließlich den Metallurgen. Heute denkt man dabei an Begriffe wie Halbleiter, Kerntechnik, Weltraumtechnik, Zonenschmelzen, chemische Transportreaktionen, Kristallzüchtung. Während der Metallurge sich vorwiegend mit Gleichgewichten kondensierter Phasen bei Normaldruck beschäftigte, spielt sowohl die Gas-

phase als auch der Einfluß höherer Drücke heute eine zunehmende Rolle.

Dies war der eine Grund für den Autor, das vorliegende Buch zu schreiben. Der zweite lag darin, daß die bisher dieses Gebiet behandelnden Bücher phänomenologisch angelegt sind und sich vorwiegend graphischer Darstellungen bedienen, während die mathematische Behandlung vernachlässigt wurde. Das Vorhandensein von Computern hat hier neue Wege eröffnet.

Zunächst wird die thermodynamische Basis erarbeitet und an den Gleichgewichten einkomponentiger Systeme erprobt. Bei den folgenden binären und pseudobinären Systemen betrachtet der Autor nur ideale Modellsysteme, ohne die Bedeutung solcher Begriffe wie Fugazität oder Aktivität abzuwerten. Eine konsequente mathematische Behandlung dieser idealen Systeme ermöglicht das Verständnis der Gesetzmäßigkeiten, die den beobachteten Typen von Phasengleichgewichten zugrunde liegen. Insbesondere wird an zahlreichen Beispielen der Einfluß der Parameter wie Schmelztemperatur und -wärme der beteiligten reinen Komponenten, Dissoziation oder Assoziation in Schmelze oder Festkörper, äußerer Druck und eigener Dampfdruck quantitativ untersucht. Die berechneten Modellsysteme, die graphisch dargestellt sind, werden mit Beispielen aus der Literatur verglichen. Auch so bizarre Systeme wie solche, die ununterbrochene Mischkristallbildung mit Schmelzminimum aufweisen, werden auf dieser Basis berechnet. Danach folgen einige Kapitel, die sich mit ternären Systemen befassen. Anwendungsbeispiele wie Reinigung durch Destillation oder Zonenschmelzen sowie chemische Transportreaktionen runden das Bild ab.

Das letzte, weniger glückliche Kapitel behandelt experimentelle Methoden. Hier fehlen wichtige Methoden vollständig, wie EMK- oder kalorimetrische Messungen. Andere Aspekte wie das Funktionieren eines Thermoelementes werden zu ausführlich beschrieben.

Allgemein kann man sagen, daß das Buch den Zugang zu dem komplexen Gebiet der Phasengleichgewichte erleichtern dürfte, wozu wesentlich die Beschränkung auf Modellsysteme beiträgt. Es ist so in gleicher Weise geeignet für fortgeschrittene Studierende wie für Praktiker, die zu den grundlegenden Gesetzmäßigkeiten der Phasengleichgewichte vorstoßen wollen.

Hans Rau [NB 947]

Die Wiedergabe von Gebrauchsnamen, Handelsnamen, Warenbezeichnungen und dgl. in dieser Zeitschrift berechtigt nicht zu der Annahme, daß solche Namen ohne weiteres von jedermann benutzt werden dürfen. Vielmehr handelt es sich häufig um gesetzlich geschützte eingetragene Warenzeichen, auch wenn sie nicht eigens als solche gekennzeichnet sind.

Redaktion: 694 Weinheim, Boschstraße 12; Telefon (06201) 3791, Telex 465516 vchwh d.

© Verlag Chemie GmbH, Weinheim/Bergstr. 1971. Printed in Germany.

Alle Rechte, insbesondere die der Übersetzung in fremde Sprachen, vorbehalten. Kein Teil dieser Zeitschrift darf ohne schriftliche Genehmigung des Verlages in irgendeiner Form – durch Photokopie, Mikrofilm oder irgend einem anderen Verfahren – reproduziert oder in eine von Maschinen, insbesondere von Datenverarbeitungsmaschinen verwendbare Sprache übertragen oder übersetzt werden. All rights reserved (including those of translation into foreign languages). No part of this issue may be reproduced in any form – by photoprint, microfilm, or any other means – nor transmitted into a machine language without the permission in writing of the publishers. – Nach dem am 1. Januar 1966 in Kraft getretenen Urheberrechtsgesetz der Bundesrepublik Deutschland ist für die fotomechanische, xerographische oder in sonstiger Weise bewirkte Anfertigung von Vervielfältigungen der in dieser Zeitschrift erschienenen Beiträge zum eigenen Gebrauch eine Vergütung zu bezahlen, wenn die Vervielfältigung gewerblichen Zwecken dient. Die Vergütung ist nach Maßgabe des zwischen dem Börsenverein des Deutschen Buchhandels e. V. in Frankfurt/M. und dem Bundesverband der Deutschen Industrie in Köln abgeschlossenen Rahmenabkommens vom 14. 6. 1958 und 1. 1. 1961 zu entrichten. Die Weitergabe von Vervielfältigungen, gleichgültig zu welchem Zweck sie hergestellt werden, ist eine Urheberrechtsverletzung.

Verantwortlich für den wissenschaftlichen Inhalt: Dipl.-Chem. Gerlinde Kruse, Weinheim/Bergstr. – Verantwortlich für den Anzeigenanteil: W. Thiel, Weinheim/Bergstr. – Verlag Chemie GmbH (Geschäftsführer Jürgen Kreuzhage und Hans Schermer), 694 Weinheim/Bergstr., Pappelallee 3. Telefon (06201) 3635. Telex 465516 vchwh d – Gesamtherstellung: Zechnerische Buchdruckerei, Speyer/Rhein.