

enthalten die beiden von G. A. Segal herausgegebenen Bände 7 und 8 der Serie *Modern Theoretical Chemistry (Semiempirical Methods of Electronic Structure Calculations*, Plenum Press, New York 1977).

Das Verhältnis der Quantenchemie zu Physik und Chemie sowie die Alternative ab-initio- oder semiempirische Rechenverfahren lassen sich am besten anhand von Tabelle 1 diskutieren, in der die jährliche Anzahl quantenchemischer Publikationen (ab-initio-Verfahren in Klammern) in einigen Zeitschriften angegeben ist.

Tabelle 1.

Jahr	<i>J. Chem. Phys.</i>	<i>J. Am. Chem. Soc.</i>	<i>Angew. Chem.</i>
1960	88	1	0
1961	136	0	1
1962	217	1	0
1963	244	14	1
1964	292	7	2
1965	288	19 (1)	3
1966	209	23	2
1967	252	18 (4)	2
⋮	⋮	⋮	⋮
1985	60	145 (121)	6

In den Jahren nach 1960 stieg in physikalischen Zeitschriften die Anzahl quantenchemischer Publikationen infolge der Computerentwicklung sprunghaft an. Mitte der sechziger Jahre war ein Maximum erreicht, und gleichzeitig fanden quantenchemische Publikationen Eingang in chemische Zeitschriften – sogar in solche, die in Ländern erscheinen, denen ein ausgeprägter chemischer Traditionalismus nachgesagt wird. Dieser Umbruch ist im wesentlichen Dewar und Hoffmann zu verdanken. Um diese Zeit war die Quantenchemie in zwei Lager gespalten: das physikalisch (ab-initio-Verfahren) und das chemisch orientierte (semiempirische Verfahren). Publikationen, deren Ergebnisse mit ab-initio-Verfahren erhalten worden waren, fanden ab Mitte der sechziger Jahre nur zögernd Eingang in die chemische Literatur. Heute, zwanzig Jahre später, werden quantenchemische Arbeiten deutlich mehr in der Chemie als in der Physik durchgeführt, und semiempirische Verfahren spielen nur noch eine untergeordnete Rolle; nennenswert waren 1985 nur MNDO (17 Publikationen in den drei Zeitschriften von Tabelle 1) und EHT (7). Zwei Argumente für semiempirische Verfahren verlieren zusehends ihre Kraft: „Oft sind bereits qualitative Aussagen ausreichend“ und „Große Moleküle erfordern einschneidende Näherungen in den Rechenverfahren“. Ab-initio-Verfahren haben inzwischen das sphärische C₆₀-Molekül und ein DNA-Fragment mit drei gestapelten Basenpaaren gemeistert. Die Tendenz der Quantenchemie geht eindeutig zur numerisch zuverlässigen Aussage durch ab-initio-Verfahren.

Zweifellos ist die Entwicklung der Quantenchemie mit der der Computer eng verknüpft. Um aber hinsichtlich des Erwachsenwerdens keine Mißverständnisse aufkommen zu lassen, sei dieser Versuch einer Entwicklungsstudie mit Worten von Coulson abgeschlossen: „Unser Verständnis ... muß auf einfachen physikalischen Modellen beruhen, die leicht einer bildhaften Sprache unterworfen werden können, aber weniger eines Zahlenfriedhofs bedürfen, den ein Rechenautomat produziert hat. Sind unsere Formen des Verstehens richtig, so werden sie durch quantenchemische Rechnungen bestätigt werden; wenn nicht, so müssen die Ideen verworfen werden“.

Rudolf Janoschek [NB 775]
 Institut für Theoretische Chemie
 der Universität Graz

Mikrobiologische und biochemische Verfahrenstechnik; eine Einführung. Von A. Einsele, W. Samhaber und R. K. Finn. VCH Verlagsgesellschaft, Weinheim 1985. X, 248 S., geb. DM 88.00. – ISBN 3-527-26117-6

Mit dem Erscheinen dieses Buches gibt es jetzt ein „Highlight“ in der deutschsprachigen Fachliteratur. Den Autoren ist es gelungen, den interdisziplinären Charakter der Biotechnologie in ein Lehrbuch zu integrieren. Das Buch umfaßt acht Kapitel. Nach einer Einführung in die Mikrobiologie und einer Übersicht über mikrobielle Prozesse gelangt man schließlich zur Bioprozeßkinetik. Die Kapitel „Stofftransport in biologischen Systemen“, „Sterilisation“, „Bioreaktor“ und „Prozeßleittechnik“ bilden das verfahrenstechnische Standbein. Sie erläutern die ingenieurwissenschaftlichen Grundlagen, an die sich die Besprechung der Aufarbeitung anschließt.

Jedes Kapitel bildet eine geschlossene Einheit, so daß der Leser je nach Vorkenntnis und Interesse sich den einzelnen Gebieten widmen kann, ohne an eine bestimmte Reihenfolge gebunden zu sein. Der mikrobiologisch vorgebildete Leser wird die ersten drei Kapitel überschlagen, denn sie liefern eine kurze Einführung zu den Themen Stoffwechsel und Regulation und klassifizieren mikrobielle Prozesse, um die mannigfachen Möglichkeiten der Mikroorganismen zu demonstrieren. Über die komplexen Nährstoffansprüche und wichtigsten Wachstumsparameter kommt man zur Biomassebestimmung. Mit der kinetischen Formulierung der statischen und kontinuierlichen Kultur schließt der Abschnitt Bioprozeßkinetik ab.

Eine zentrale Rolle für die Bioreaktoren spielt die Sauerstoffversorgung; daher beschäftigt sich das vierte Kapitel mit dem Stofftransport. Die Grundlagen sind die Sauerstofflöslichkeit in Wasser (Henry-Gesetz) und der Sauerstoff-Transportkoeffizient $K_L a$, für deren Berechnung drei Methoden mit ihren Vor- und Nachteilen vorgestellt werden. Anhand mehrerer Beispiele wird der theoretische Zusammenhang verdeutlicht. Weitere Transportwiderstände wie Zellagglomerate und Biofilme und das rheologische Verhalten eines Systems werden ebenfalls berücksichtigt.

Die anschließende Exkursion in die Steriltechnik ist relativ knapp und enthält neben zwei Berechnungsbeispielen und der kontinuierlichen Dampfsterilisation noch die Sterilisation von Gasen.

Viel Platz nehmen der Bioreaktor und die Meß- und Regeltechnik ein. Auf gut 100 Seiten muß sich der Leser mit den Aspekten Belüften, Durchmischen, Sauerstoffeintrag und den wichtigsten dimensionslosen Kennzahlen (z. B. Newtonzahl) auseinandersetzen. Es folgen andere Reaktorsysteme, das Problem der Maßstabsvergrößerung (Scale up) und die Anwendungsgebiete von Spezialreaktoren (Trägerfixierung, tierische Zellkulturen). Die dazu notwendige Peripherie von Meßfühlern, Gassonden, Enzymelektroden, Analysegeräten und der Einsatz von Computern sind Gegenstand der Prozeßleittechnik und unbedingt erforderlich, um die komplexen Abläufe im Fermenter transparenter zu machen. Besonders ausführlich wird hier auf die Elektrodentypen eingegangen. Die Aufarbeitung in der Biotechnologie rechtfertigt allein ein Lehrbuch; deshalb können hier im Schlußkapitel nur generelle Gesichtspunkte und das methodische Vorgehen vermittelt werden. Typisch für den gesamten Aufarbeitungsvorgang sind bestimmte Grundoperationen, z. B. als Anfangsschritt eine Fest/Flüssig-Trennung. Im Mittelpunkt steht hier die Filtrationstechnik, da sich dieser Bereich in der letzten Zeit stark entwickelt hat. Das Buch beleuchtet die potentiellen Einsatzmöglichkeiten und Probleme. Erläutert werden außerdem Sedimentation, Zentrifugation und Chromatographieverfahren.

Der vorlesungshafte Charakter des Werkes erleichtert es dem Neuling in Sachen Biotechnologie, sich schnell und leicht in die Materie einzuarbeiten, Sachverhalte nachzuvollziehen oder sich neue Erkenntnisse anzueignen. Dem Praktiker dient dieses Buch als Nachschlagewerk und ist somit eine sinnvolle Ergänzung der eigenen Bibliothek. Die gute Gliederung und die ausgezeichnete drucktechnische Gestaltung tragen mit zum positiven Eindruck bei. Als Rezensent habe ich dieses Buch mit Interesse gelesen, da der klar und verständlich geschriebene Text ein spannendes und angenehmes Lesen ermöglicht. Auf knapp 250 Seiten kann natürlich nur ein kleiner Ausschnitt des Feldes Biotechnologie wiedergegeben werden. Wer sich darüber hinaus mit diesem Fachgebiet beschäftigen will, kommt an weiterführenden Büchern nicht vorbei. Es wäre wünschenswert, wenn dieses Buch als Keimzelle eines wesentlich umfangreicheren Werkes diente; dabei bliebe zu hoffen, daß die guten Eigenschaften beim „Scale up“ nicht verloren gehen. Nachzudenken ist auch über den Verkaufspreis des Buches, für das ich eine Empfehlung aussprechen möchte, denn im Vergleich zu anderen Lehrbüchern ist das Preis-Leistungsverhältnis doch sehr ungünstig.

Gunnar Pommerening [NB 739]
Kernforschungsanlage Jülich

Molecular Semiconductors. Photoelectrical Properties and Solar Cells. Von J. Simon und J.-J. André. Springer-Verlag, Berlin 1985. XIII, 288 S., geb. DM 174.00. – ISBN 3-540-13754-8

Organische, metallorganische und polymere Verbindungen mit unkonventionellen Eigenschaften wurden in den letzten Jahren zunehmend bearbeitet. Die Synthese derartiger Materialien und die Untersuchung ihrer elektrischen, elektrochemischen, magnetischen und optischen Eigenschaften hat sich zu einem der attraktivsten Forschungsgebiete entwickelt. Der Stoffsammlung auf der einen und der Erklärung der Phänomene von Ladungstransport, -wechselwirkung und -speicherung auf molekularer Ebene auf der anderen Seite werden in den nächsten Jahren mit Sicherheit weitere wichtige Arbeiten gewidmet sein. Wegen der großen Zahl an Publikationen auf diesem Gebiet ist es sehr zu begrüßen, daß eine Monographie vorgelegt wurde, die sich mit einigen Aspekten derartiger Materialien auseinandersetzt.

Die ersten beiden Kapitel befassen sich mit den physikalischen Grundlagen des Ladungstransportes in Festkörpern und mit photoelektrischen Phänomenen. Nach Erläuterung der Gesetzmäßigkeiten anorganischer Festkörper werden jeweils Beispiele für „molekulare“ Kristalle und Polymere gebracht. Wegen der Heterogenität anorganischer Festkörper ist diese theoretische Behandlung ein wertvoller Ansatzpunkt zum Verständnis der Vorgänge. Diese ersten beiden Kapitel kommen insbesondere denjenigen zugute, die in das Arbeitsgebiet einsteigen wollen, da auf Ableitungen verzichtet wurde und die Inhalte oft durch Tabellen und Abbildungen gut verständlich veranschaulicht werden.

Bei den als „molekularen“ Halbleitern behandelten Substanzklassen legen die Autoren die Schwerpunkte auf Phthalocyanine und Polyacetylene. Hier werden jeweils zunächst Synthesen und allgemeine physikalisch-chemische Eigenschaften abgehandelt, bevor die hier interessierenden elektrischen Eigenschaften und photovoltaische Effekte inklusive Sonnenzellen besprochen werden. Sicherlich sind die Abschnitte über Synthesen und Morpho-

logie notwendig, damit der Leser bei eigenen Planungen Orientierungshilfen erhält. Untersuchungen der Eigenschaften von z. B. Phthalocyaninen in Lösung wie Elektrospektren, photophysikalische Eigenschaften, Redoxverhalten hätten, da sie nicht eigentlich Thema des Buches sind, wesentlich kürzer abgehandelt werden können; stärker hätten festkörperphysikalische Eigenschaften betont werden sollen. Im Kapitel über die Eigenleitfähigkeit der Phthalocyanine hätte man sich eine Tabelle mit den charakteristischen Kenndaten wichtiger Phthalocyanine gewünscht. Bei den „dotierten“ Phthalocyaninen fehlt die eingehendere Berücksichtigung der Arbeiten aus dem Tübinger Arbeitskreis von Hanack. Auch die Beschreibung des photochemischen Lochbrennens bei Phthalocyaninen als alternative Speichermethode auf molekularer Ebene hätte eine Bereicherung sein können. Im Kapitel über Polyacetylene werden die der Zielsetzung des Buches entsprechenden Inhalte ausführlich beschrieben und diskutiert.

Im letzten Kapitel werden andere molekulare Halbleiter vorgestellt. Dies geschieht meist zu kurz. Einige neuere „alternative“ Materialien, z. B. Polyphenylsulfid, Polyanilin, Polythietylen, fehlen leider ganz. Es hätte dem hohen Anspruch des Buches gut getan, die in einigen Publikationen und auf zwei Konferenzen vorgestellte, allerdings noch nicht realisierte molekulare Elektronik (molekulare Leiter, Speicher, Schalter, Transistoren) zukunftsweisend zu behandeln. Das kurze Kapitel „Conclusion“ ist hier keine Alternative.

Insgesamt füllt das Buch auf dem expandierenden Gebiet der „alternativen“ Materialien eine Marktlücke. Für den hier arbeitenden Wissenschaftler ist diese Übersicht eine Bereicherung. Auch demjenigen, der in das Gebiet einsteigen möchte, sei das Buch als Starthilfe sehr empfohlen.

Dieter Wöhrle, Andreas Jahn [NB 738]
Institut für Organische und
Makromolekulare Chemie
der Universität Bremen

The Chemistry of the Metal-Carbon Bond. Vol. 2: The Nature and Cleavage of Carbon-Metal Bonds. Vol. 3: Carbon-Carbon Bond Formation using Organometallic Compounds. Herausgegeben von F. R. Hartley und S. Patai. John Wiley, Chichester 1985. Vol. 2: XIII, 904 S., geb. £ 155.00. – ISBN 0-471-90282-9; Vol. 3: XIV, 489 S., geb. £ 98.00. – ISBN 0-471-90557-7

Nachdem 1982 Band 1 der vorliegenden Serie erschienen war^[*], kamen nun im vergangenen Jahr fast gleichzeitig die Bände 2 und 3 auf den Markt, die den Themenbereichen „Spaltung von Metall-Kohlenstoff-Bindungen“ und „Bildung von Kohlenstoff-Kohlenstoff-Bindungen mit Hilfe metallorganischer Verbindungen“ gewidmet sind. Um es gleich vorweg zu nehmen: beide Bände sind wesentlich homogener und damit auch nützlicher als der Eröffnungsband, der recht konzeptionslos zusammengestellt wirkt. Leider fehlt auch in Band 2 das wichtige Kapitel über photochemische Spaltungsreaktionen, das in einen späteren Teil aufgenommen werden soll. Da genaue Angaben über den Umfang der Serie fehlen, bleibt vorerst abzuwarten, welche weiteren Schwerpunkte vorgesehen sind.

Band 2 beginnt mit einem nicht allzu ausführlichen Kapitel über die elektrochemische Spaltung von Metall-Koh-

[*] Vgl. *Angew. Chem.* 96 (1984) 730.