

handelt. In beiden Beiträgen wird auch auf speziellere Verfahren wie Hochdruckextraktion und die Verwendung zweiphasig-wäßriger Systeme eingegangen. Im abschließenden Kapitel des Buches wird noch einmal zusammengefaßt, in welche Richtung sich gegenwärtig die einzelnen Anwendungsbereiche entwickeln.

Dieses Werk ist nicht als Einführung in das Fachgebiet geschrieben, sondern will mit Beiträgen anerkannter Autoren den Stand des Wissens zusammenfassen und zu weiteren Arbeiten anregen. Durch die wissenschaftlich orientierte Darstellungsweise dürfte es vor allem für Ingenieure und Chemiker interessant sein, die in der universitären und industriellen Forschung tätig sind. Es vermittelt dem Leser einen guten Überblick über die theoretischen Grundlagen und über wichtige Anwendungsgebiete von Extraktionsverfahren. Ein umfangreiches Stichwortverzeichnis ermöglicht zudem auch das gezielte Nachschlagen von Fachbegriffen. Inhaltliche Überschneidungen zwischen den einzelnen Beiträgen sind in einem Buch dieser Art wohl nie ganz zu vermeiden. Durch die Betonung neuerer, auch unkonventioneller Entwicklungen auf der Basis einer geschlossenen Darstellung der theoretischen Grundlagen ist das Buch eine wertvolle Ergänzung der Literatur zur Flüssig-Flüssig-Extraktion.

Eberhard Aufderheide
Degussa Antwerpen (Belgien)

Data Fitting in the Chemical Sciences. Von *P. Gans*. Wiley, Chichester, 1992. XII, 258 S., geb. 29.95 £. – ISBN 0-471-93412-7

Dieses Buch stellt die mathematischen Grundlagen der gängigsten Methoden der Datenbearbeitung vor. Mit zunehmender Nutzung von Mikrocomputern und Programmbibliotheken bei der Datenerfassung und -darstellung ist das Buch, welches für eine kritische Anwendung statistischer Verfahren auch die Grenzen der mathematischen Methoden zeigt, von großem Nutzen. So wird in der Einleitung (Kapitel 1) exemplarisch gezeigt, daß experimentelle Daten nur mit Hilfe eines Modells interpretiert und dargestellt werden können. Kapitel 2 beschäftigt sich mit Meßgrößen und ihren Fehlern sowie der Fehlerfortpflanzung. Der Autor versucht, den Unterschied zwischen systematischen und statistischen Fehlern mit einem Beispiel zu veranschaulichen, denn nur statistische Fehler können mit mathematischen Verfahren analysiert werden. In den folgenden zwei Kapiteln werden lineare und nichtlineare Verfahren der kleinsten Fehlerquadrate behandelt. Der Autor beschreibt auch die Herleitung der Formeln, die in den meisten Anwenderprogrammen genutzt werden, so daß der interessierte Leser bis zum Endergebnis folgen kann. Zwar ist nicht jeder Chemiker mit der benutzten Matrizenschreibweise so vertraut wie P. Gans, doch lockert die Behandlung von einfachen Beispielen die trockenen mathematischen Herleitungen auf. Kapitel 5 und 6 widmen sich den für die Interpretation oder Darstellung der Meßgrößen benötigten empirischen bzw. theoretischen Modellen. Dabei werden zuerst einschränkende Bedingungen der zu bestimmenden Modellparameter diskutiert. Es folgt eine Ausführung zur Kontrolle der Experimente, um Meßdaten hoher Qualität zu erhalten. Hier warnt der Autor noch einmal ausdrücklich vor systematischen Fehlern, die nicht durch statistische Methoden analysiert werden können. „Sometimes a factor may be unsuspected (systematischer Fehler) until after the experiment has been performed and the data analysed. In that case it is better to repeat the experiments with that factor under control than to try to

extract information from flawed data.“ Kapitel 6 behandelt die Frage nach der Anwendbarkeit der Methode der kleinsten Fehlerquadrate und schlägt Kriterien vor, mit denen aufgrund der statistischen Eigenschaften der Meßdaten Modelle verworfen werden können. Dabei wird immer wieder betont, daß auch mit der besten Statistik Modelle nicht bewiesen werden können. Die zweite Hälfte des Buches ist speziellen Problemen der Datenanpassung gewidmet: Kapitel 7 beschäftigt sich mit der Datendarstellung durch Polynome sowie den Methoden der Glättung und Differentiation. In Kapitel 8 werden Datenanpassungen an Spline-Funktionen, einfache und Mehrfach-Exponentialfunktionen, Gauß- und Lorentz-Funktionen sowie trigonometrische Funktionen und Oberflächenfunktionen behandelt. Kapitel 9 gibt eine Zusammenfassung der Fourier-Transformation, soweit sie in Bezug zur Datenanpassung steht. In Kapitel 10 wird eine sehr spezielle Anwendung der statistischen Methoden auf das Gebiet der potentiometrischen Titration vorgestellt, mit der sich der Autor in der Vergangenheit beschäftigt hat. Das Buch endet mit einem Anhang aus sieben Unterkapiteln, in dem Definitionen der wichtigsten Begriffe der Statistik, eine kurze Darstellung der Matrizenrechnung, der partiellen Differentiation, der Berechnung von Erwartungswerten und kleinere mathematische Beweise zu finden sind.

Der Autor hat sich zum Ziel gesetzt, die Vorgänge bei der Datenerfassung und -analyse in der „black box“ (Mikrocomputer nebst Anwenderprogramm) darzulegen und insbesondere die Probleme und Schwierigkeiten bei der Handhabung von Daten zu zeigen. Im Buch wird eindringlich vor möglichen Fallen gewarnt, die den unerfahrenen Benutzer einer solchen „black box“ bei der Interpretation seiner Daten erwarten. Das Buch wird der gestellten Aufgabe gerecht und ist für jeden Benutzer von Mikrocomputern und Anwenderprogrammen für statistische Datenanalyse von großem Nutzen. Ich kann die Lektüre dieses Buches nur uneingeschränkt empfehlen.

Horst Hippler
Institut für Physikalische Chemie
der Universität Göttingen

Rapid Reactions in Solution. Von *H. Strehlow*. VCH Verlagsgesellschaft, Weinheim/VCH Publishers, New York, 1992. XIV, 341 S., geb. 176.00 DM. – ISBN 3-527-28260-2/1-56081-126-9

Wer sich als Student oder Wissenschaftler über schnelle Reaktionen informieren will, muß feststellen, daß seit Edward Caldins Buch „Fast Reactions in Solution“ aus dem Jahr 1964 keine umfassende Darstellung der Methoden und Ergebnisse dieses Gebiets erschienen ist. Die Lücke in der Literatur füllt jetzt das Buch von Hans Strehlow.

Schnelle Reaktionen sind im Sprachgebrauch des Chemikers Reaktionen im Zeitbereich von Nanosekunden bis Sekunden – bei den heute erfaßbaren noch schnelleren Prozessen im Femtosekundenbereich wird ja noch diskutiert, was ein Chemiker daraus lernen könnte. Sie sind nicht Thema des Buches. Strehlow hebt in der Einleitung hervor: Wer sich mit der Dynamik chemischer Prozesse beschäftigt, ist nicht in erster Linie an möglichst genauen Zahlenwerten für Geschwindigkeitskonstanten interessiert, sondern hat das Ziel, Reaktionsmechanismen aufzuklären und die Elementarschritte in einem komplexen System nachzuweisen und zu charakterisieren. Es ist Strehlows Anliegen, den interessierten Forscher durch Anwendungsbeispiele möglichst umfassend zu informieren, um die für sein Problem geeignetste Methode auszuwählen. Das schafft das Buch sicher nicht

alleine, aber es bildet eine solide Basis für weitergehende Diskussionen mit den Experten – Strehlow ist unbestritten einer der kompetentesten. Er hat fast alle Methoden selbst angewendet, teilweise selbst entwickelt und mit seiner Arbeitsgruppe am Max-Planck-Institut in Göttingen viele Beiträge zum Verständnis der Lösungsreaktionen geleistet.

Das Buch ist nach den Methoden gegliedert. Am Anfang stehen die Strömungsmethoden, die inzwischen sogar für Reaktionen im Mikrosekundenbereich angewendet werden können. Breiten Raum nehmen die Relaxationsmethoden ein und die Kernmagnetische Resonanz. Am Ende stehen Flash-Photolyse und Puls-Radiolyse. Daß Strehlow aufs engste mit der Elektrochemie verbunden ist, zeigt, daß die so moderne und erfolgreiche NMR-Methode praktisch gleichwertig neben der für Homogenreaktionen doch sehr speziellen Polarographie steht. Hier ist zu erkennen, daß ihm auch an der Darstellung des Gebiets in seinen historischen Entwicklungen gelegen ist. Leider wird die Fluoreszenzlöschung nur kurz unter dem Stichwort „Weitere Verfahren“ erwähnt. Gerade diese Methode hat sich in den letzten Jahren vor allem in der Kolloidchemie als äußerst aussagekräftig erwiesen, die Meßtechnik ist hoch entwickelt, und die Weiterführung der (Perrinschen) Theorie der Fluoreszenzlöschung für kompartimentierte Systeme hat neue Wege für die Interpretation eröffnet.

Als Anwendungsbeispiele sind einerseits die frühen Untersuchungen in Eigens Arbeitskreis gewählt, die grundsätzliche Aussagen zu Elementarschritten von Protonenübertragung, Metallkomplexbildung und Enzym-Substrat-Wechselwirkung gebracht haben. Überwiegend werden jedoch die Systeme angeführt, die in Strehlows Arbeitskreis in großer Breite bearbeitet wurden. Aber auch ganz andere Entwicklungen werden nicht übergangen. Ein Beispiel dafür ist die Fluktuationsanalyse, die unter anderem auf dem Gebiet der Membranforschung Bedeutung erlangt hat. Beispiele aus dem biophysikalisch-chemischen Bereich und auch Hinweise darauf sind allerdings in Strehlows Buch sonst wenig zu finden.

Die Einführung in theoretische Zusammenhänge zeigt, daß Strehlow ein hervorragender akademischer Lehrer ist, der die Prinzipien herausarbeitet. Die Einführung in die Kinetik der Micellbildung ist ein Beispiel, bei dem die Diskussion des vereinfachten Systems den Zugang zu dem abstrakteren Formalismus ideal vorbereitet. Auch die Einführung in die Kernresonanz, bei der im Rahmen der Physikalischen Chemie insbesondere die Bloch-Gleichungen und ihre Erweiterungen von Interesse sind, finde ich didaktisch ausgezeichnet – und meine Studenten haben auch schon gelacht über die Illustration zum Spin-Echo-Experiment. Die gelegentlichen Cartoons tragen vielleicht sogar zum besseren Verständnis bei. Hier ist auch zu erwähnen, daß das Buch sehr sorgfältig redigiert ist und ein vorbildliches Layout aufweist.

Dem Buch ist eine Diskette mit Auswerteprogrammen beigelegt. Dies mag für manchen von Nutzen sein, allerdings stehen heute viele Statistik- und Graphikprogramme zur Verfügung, und Arbeitsgruppen, bei denen Relaxationskurven oder Korrelationsfunktionen anfallen, haben zur Anpassung an Exponentialfunktionen im allgemeinen das Programm „Discrete“ auf den Computern installiert.

Viele Wissenschaftler, die mit schnellen Reaktionen zu tun haben, sind Mitglieder der „Fast reactions in solution discussion group“ der Royal Society und treffen sich jährlich zu einer Diskusstagung. Ein Gründungsmitglied dieser Gruppe war Edward Caldin, der auch heute noch an dieser Tagung aktiv teilnimmt. Ich habe ihn beim diesjährigen Treffen auf Strehlows Buch angesprochen. Er reagierte ganz spontan: „I am delighted that my book has been replaced by

Professor Strehlows book, which I have read and greatly admire“. Dieser Meinung kann auch ich mich anschließen.

Georg Ilgenfritz

Institut für Physikalische Chemie
der Universität Köln

Labordaten-Verarbeitung mit Labor-Informations- und -Management-Systemen (LIMS). (Reihe: Datenverarbeitung in den Naturwissenschaften, Reihenherausgeber: C. Bliefert und J. Kwiatkowski.) Von V. Neitzel. VCH Verlagsgesellschaft, Weinheim, 1992. XII, 231 S., geb. 148.00 DM. – ISBN 3-527-28439-7

Chemische Analytik ist heute fast ausschließlich instrumentelle Analytik, beherrscht von einer Vielzahl halb- oder vollautomatischer Analysengeräte. Die damit verbundene Flut an analytischen Daten für eine einzelne Probe wird aufgrund des Mangels an geeigneten Soft- und Hardwarelösungen in praxi nur allzu häufig durch eine unzulässige Reduktion und Vereinfachung der Daten bewältigt statt durch ein sinnvolles Informationsmanagement. Labor-Informations- und -Management-Systeme (LIMS) unterstützen durch automatisierte Erfassung und Verwaltung der relevanten Daten die Qualität der Informationen und die Effizienz eines analytischen Labors durch größere Transparenz sowie Lokalisierung von Engpässen und Überhängen. Das vorliegende Buch von Volkmar Neitzel ist ein Leitfaden für den Analytiker, der sich über die Möglichkeiten eines LIMS zur Produktivitätssteigerung informieren möchte oder sich konkret mit dessen Einführung auseinandersetzen muß.

Nach der Einführung der einfachsten Grundbegriffe der Datenverarbeitung werden im ersten Kapitel zunächst der Weg einer Probe und der dazugehörige veränderliche Informationsfluß diskutiert, welche Daten und Parameter vom LIMS erfaßt werden können und was ein solches System im Laboralltag leisten kann. Kapitel zwei führt den Leser schrittweise durch die einzelnen Phasen der LIMS-Einführung: Die Vorstudie (eine Analyse des Istzustandes im Labor bezüglich der Arbeitsabläufe und der Wirtschaftlichkeit), das Grobkonzept, das die Anforderungen an die Hard- und Software konkretisiert, und schließlich die Ausschreibung auf der Grundlage eines Pflichtenheftes. Für die einzelnen Phasen erhält der Leser hier nicht nur detaillierte Checklisten für die Systemanalyse, d. h. für die Analyse von Arbeitsabläufen, vom zu erwartenden Probenspektrum und vom damit verbundenen Datenfluß innerhalb des Labors, sondern auch eine Anleitung für eine einfache Kosten-Nutzen-Rechnung und Abschätzung der Wirtschaftlichkeit eines LIMS. Die gesamte Materie wird dabei sehr lebendig und mit vielen Beispielen aus der analytischen Praxis diskutiert. Berücksichtigt werden dabei auch häufig vernachlässigte Details wie Sicherheitsaspekte, Einbindung vorhandener Hardware, vertragliche Randbedingungen bei der Ausschreibung und innerbetriebliche Organisationsfragen. Das dritte Kapitel befaßt sich mit der für die LIMS-Implementierung notwendigen Hardware wie mögliche Rechnersysteme, Schnittstellen, Netzwerke usw., wird dem EDV-erfahrenen Leser allerdings kaum Neues bieten. Ferner finden sich ausführliche Aufstellungen mit allgemeinen Kriterien für den Hardwarekauf. Das vierte Kapitel ist dem zugrundeliegenden Datenbanksystem eines LIMS gewidmet. Hier werden zunächst die für den Umgang mit der Datenbank notwendigen Begriffe zur Beschreibung und Struktur von Daten eingeführt und Datenbankkonzepte wie hierarchische oder relationale Verknüpfungen beschrieben. Nach diesen mehr abstrakten Ausführungen werden die in der analytischen