

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 Matrizenbeschreibung 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 Fällen 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 uningeschränkt 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 geeignete Methode auszuwählen. Das schafft das Buch sicher nicht