

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 Datenbanksysteme wie hierarchische oder relationale Verknüpfungen beschrieben. Nach diesen mehr abstrakten Ausführungen werden die in der analytischen

Praxis auftretenden Stamm- und Bewegungsdaten, aber auch Fragen der Verschlüsselung und der notwendigen Software-Schnittstellen behandelt. Beispiele garantieren auch hier wieder die Lesbarkeit und ermöglichen, zusammen mit einer entsprechenden Checkliste, eine sachgerechte Beurteilung der LIMS zugrundeliegenden Software. Das fünfte Kapitel bringt nun dem Leser das Leistungsspektrum eines LIMS konkret nahe, d.h. wie Probenplanung, Anforderungserfassung, häufig diskutierte Fragen wie Plausibilität und interne Validierung, Kostenrechnung und Berichterstellung durch ein LIMS verbessert werden können. Darüber hinaus werden hier Möglichkeiten gezeigt, ein LIMS auch für zusätzliche Aufgaben wie Personalmanagement, statistische Auswertungen und Informations-Retrieval zu nutzen. Kapitel sechs stellt kurz die derzeit auf dem Markt vorhandene Hard- und Software zum Kauf oder zur Eigenentwicklung eines LIMS vor. Das vorletzte Kapitel gibt Hinweise zur Einführung eines LIMS in ein analytisches Labor unter Berücksichtigung der notwendigen Schulung, Dokumentation und Pflege des Systems. Abschließend gibt der Autor einen Ausblick auf die – bedingt durch die rasante Hardwareentwicklung – in Zukunft verstärkt zu erwartende Fusion von Analysegerät und LIMS.

Insgesamt erhält der Leser einen guten Einblick, was ein LIMS für die Laborpraxis und die Produktivität eines Labors bedeuten und leisten kann. Der übersichtliche Aufbau, gewürzt durch zahlreiche anschauliche Beispiele aus der Praxis, und die für die konkrete Realisierung eines LIMS sehr hilfreichen Checklisten machen dieses Buch zu einem lobenswerten Leitfaden für den Analytiker und lassen keine Berührungssängste mit der Materie aufkommen.

Ulrich Panne

Institut für Hydrochemie
der Technischen Universität München

The Meaning of Quantum Theory. Von *J. Baggott*. Oxford University Press, Oxford, 1992. XIV, 230 S., geb. 11.95 £. – ISBN 0-19-855575-X

In den letzten Jahren sind zunehmend Bücher über technische Aspekte der Quantenmechanik/Quantenchemie für theoretisch interessierte Chemiker publiziert worden. Trotz aller Unterschiede in den gesetzten Schwerpunkten und Schwierigkeitsgraden folgen die meisten Beiträge einer gemeinsamen Ausrichtung. Im Mittelpunkt steht die Vermittlung quantentheoretischer Methoden. Quantentheorie wird hier als ingenieurwissenschaftliches Handwerkszeug aufbereitet. Leser, die mit dieser Erwartung an das Buch von J. Baggott gehen, werden mit Sicherheit enttäuscht sein. Baggott versucht, der Frage nach der Bedeutung der Quantentheorie als naturwissenschaftlich-philosophisches Gedankengebäude nachzugehen. Die wichtigste Botschaft läßt sich in einem prägnanten Satz formulieren: Für die zentralen Elemente der Quantentheorie ist mehr als nur eine Interpretation möglich. Exemplarisch zeigt dies Baggott an der alten Auseinandersetzung zwischen der positivistischen Schule von Bohr und dem jungen Heisenberg und der realistischen Interpretation der Wellenmechanik, die von Einstein und Schrödinger propagiert wurde. Der positivistische quantentheoretische Ansatz ist ein puristisches Gedankengebäude. Baggott beschreibt den Positivismus als Anschauung, die davon ausgeht, daß jede Beobachtung eines Quantensystems eine Störung involviert und deshalb ein Hamilton-Operator heranzuziehen ist, der sowohl das Quantensystem als auch den Spektrometer/Beobachter enthält.

Die realistische Betrachtungsweise charakterisiert Baggott durch den Begriff der „lokalen Realitäten“. In diesem Rah-

men ist die Beschreibung eines experimentellen Systems auch durch eine Restriktion auf lokalisierte Subfragmente möglich. Baggott erläutert die naturphilosophische Auseinandersetzung an Hand historisch wichtiger Gedanken-Experimente, z.B. dem Einstein-Podolsky-Rosen-Theorem, der Bellschen Ungleichheit und der intellektuellen Konstruktion der Schrödingerschen Katze.

Das Buch ist in fünf Kapitel unterteilt. Im ersten werden die historischen Fakten zusammengestellt, die zur Entwicklung der Quantenmechanik geführt haben. Außerdem geht der Autor detailliert auf den Welle-Teilchen-Dualismus von de Broglie ein. Dieses Kapitel liefert eine leicht lesbare Einführung in die Thematik und stellt einige neue Zusammenhänge her. Im zweiten Kapitel wird zunächst das Operator-Konzept der Quantenmechanik erläutert. Baggott charakterisiert ebenfalls in transparenter Form, welche Überlegungen zur Formulierung der Schrödingers-Gleichung geführt haben. Kapitel 2 ist eher von technischer/formalistischer Natur. Der Autor erklärt leicht verständlich quantenmechanische Elemente, z.B. Zustandsvektoren im Hilbert-Raum und das Pauli-Prinzip. In Kapitel 3 wird der technische Hintergrund verlassen und die Bedeutung der Quantentheorie hinterfragt. Der Leser erfährt, wie emotional und erhitzt die Auseinandersetzungen zwischen Positivisten und Realisten oft waren. In Kapitel 4 werden die oben erwähnten Gedanken-Experimente aufgegriffen, die positivistische bzw. realistische Interpretationen untermauern sollten. Leider verliert das Buch nach ca. 100 Seiten an Spannung und Dichte. Nach Meinung des Rezensenten hätte der letzte Teil auf etwa die Hälfte gestrafft werden können. In Kapitel 5 verläßt Baggott die bisher eingeschlagene thematische Richtung und stellt Zusammenhänge zwischen Quantentheorie und Philosophie in den Vordergrund. Behandelt werden unter anderem auch die Überlegungen von Karl Popper und René Descartes. Das Kapitel endet mit metaphysischen Betrachtungen. Die Frage nach einem Gott, die hier vorsichtig und unaufdringlich gestellt wird, steht auf derselben Basis der philosophischen Determinismus/Indeterminismus-Debatte wie die Grundlagen der Quantentheorie. Deshalb die Exkursionen in religiöse Themen. Die Würdigung dieses Teils des Buches ist wohl von Leser zu Leser verschieden. Erwähnenswert sind die zum Teil pointierten Ausführungen von Baggott. Eine der schönsten Passagen auf Seite 79: It would, perhaps, be very difficult for high-energy physicists to justify the financial investments... if they were not convinced of the reality of the objects on which they wish to make measurements.

Das Buch von J. Baggott hinterfragt geschickt quantenmechanische Anschauungen, die sich in Laufe der Zeit als „bequem“ herausgestellt haben. Baggott gelingt es, den Leser für neue quantenmechanische Fragestellungen offen zu machen und dadurch bisherige Denkmodelle zu überarbeiten. Das Buch kann denjenigen empfohlen werden, die an den philosophischen Aspekten der Quantentheorie interessiert sind. Über weite Strecken ist es spannend, das Buch durchzuarbeiten. Mit Ausnahme der „technischen Informationen“ erfordert dies übrigens einige Konzentration. Schade nur, daß es der Darstellung von Baggott partiell an Homogenität mangelt. Dafür war das Vorhaben sehr ehrgeizig. Aber auch die leichte Kritik sollte nicht vom Kauf eines interessanten und stimulierenden Buches abhalten: Es wäre schön, wenn sich möglichst viele Chemiker/Physiker mit nicht-ingenieurwissenschaftlichen Fragen der Quantentheorie beschäftigen würden. Dazu ist das besprochene Buch ein guter Einstieg.

Michael C. Böhm

Institut für Physikalische Chemie
der Technischen Hochschule Darmstadt