

Unter Anleitung wird der Anfänger herausfinden, daß er mit dieser Monographie alles lernen kann, was er zum Verständnis von Spin-Gymnastik, ein- und zweidimensionaler Fourier-Theorie und dem Magischen am Probendrehen im magischen Winkel braucht. Auch erfährt er, daß es gut ist, eine frustrierend große Zahl verschiedener Achsenmodelle und scheinbar komplizierter Funktionen einzuführen und daß DOR und DAS, so schön sie konzeptionell und technisch sind, nur begrenzte Anwendungen haben. Kein Wort wird allerdings über die Flouquet-Theorie verloren.

Für den erfahrenen Leser wird sich das Buch als Goldader erweisen, die zahllose Experimente für viele Zwecke im polymerwissenschaftlichen und anderen Bereichen enthält (Man beachte, daß das Wort Experiment in der NMR-Spektroskopie ganz anders als etwa in der Hochenergiephysik verwendet wird). Bei der NMR-Spektroskopie wird bereits eine neue Pulssequenz, die über die Tastatur des Spektrometers eingegeben wird, ein neues Experiment genannt.). Die Laborpraktiker werden die vielen hilfreichen Anmerkungen zu alltäglichen Problemen schätzen.

Der Experte wird die frische Art genießen, mit der die Autoren einige einfache Fragen angehen sowie die tiefgehenden Betrachtungen, die sie einigen klassischen Problemen widmen. Wer von uns weiß zum Beispiel, ob unser Puls die Kernmagnetisierung nach rechts oder nach links dreht? K. S.-R. und H. W. S. versuchen wichtige, trotzdem oft nachlässig verwendete Begriffe klar verständlich zu machen. Beispiele sind: homogene und inhomogene Linienvibrierung, homogene und inhomogene Hamiltonians und kohärente und stochastische Prozesse.

Viel Aufmerksamkeit wird der Frage nach der grundlegenden Information, die in verschiedenen mehrdimensionalen Spektren enthalten ist, gewidmet. In diesem Zusammenhang kann der Leser etwas über die Nützlichkeit der Begriffe *vereinigte* und *bedingte* Wahrscheinlichkeiten lernen und daß bestimmte mehrdimensionale Spektren diesen exakt entsprechen werden. Die engen Beziehungen zwischen Austausch-NMR-Spektroskopie und Korrelationsfunktionen in der Neutronenbeugung werden diskutiert. Ich glaube, daß jeder, der ein mehrdimensionales Festkörper-NMR-Experiment durchgeführt hat, gut beraten ist, in dieser Monographie nachzuschlagen, ob die in den Spektren enthaltenen Informationen vollständig erkannt und verstanden worden sind. Dieser Rat ist sicher auch für jene angemessen, die Fragen bezüglich eines bestimmten Materials haben, sei es ein Poly-

mer oder auch nicht, und sich fragen, welches NMR-Experiment bei der Klärung weiterhelfen könnte. Die Monographie leistet sogar noch mehr: Sie ist eine Anleitung, von vornherein die richtigen Fragen zu stellen.

Die Abschnitte und Kapitel über Spindiffusion und Anwendungen von Spindiffusion zur Charakterisierung von Polymeren und Polymermischungen sind besondere Leckerbissen. Es ist erfrischend, daß in dieser Monographie auch wissenschaftliche Kontroversen ausgetragen werden. An diesen Stellen kann man das persönliche Engagement von K. S.-R. förmlich spüren und auch, wie stark er sich diesem Thema verschrieben hat.

Ich bin sicher, daß diese Monographie in Kürze zu *dem* Standardwerk werden wird. Das Buch ist ein Muß für alle, die sich mit Festkörper-NMR-Spektroskopie beschäftigen.

Ulrich Haeberlen

Max-Planck-Institut für
Medizinische Forschung, Heidelberg

Unimolecular Reactions. 2. Aufl., Von K. A. Holbrook, M. J. Pilling und S. H. Robertson. Wiley, Chichester, 1996. 417 S., geb. 90.00 £. – ISBN 0-471-92268-4

Das Gebiet der unimolekularen Reaktionen hat sich in den letzten Jahrzehnten stark entwickelt. Eine Vielzahl neuer Experimente ermöglichte Einblicke, wie sie vor 30 Jahren kaum vorstellbar waren; Messungen von praktisch wichtigen Reaktionen konnten mit erstaunlicher Genauigkeit vorgenommen werden. Parallel dazu ließen sich die grundlegenden Prozesse mit theoretischen Methoden zunehmend quantitativ charakterisieren. Naturgemäß veralten Monographien und Übersichtsartikel über ein so lebendiges Gebiet daher schnell. Deshalb ist es sehr zu begrüßen, daß von K. A. Holbrook, M. J. Pilling und S. H. Robertson die 1972 erschienene Monographie von P. J. Robinson und K. A. Holbrook über „Unimolecular Reactions“ gründlich überarbeitet und in vielen Teilen ergänzt worden ist. Der „Robinson-Holbrook“ bot in seiner ersten Auflage eine vorzüliche Einführung in die Anwendung der RRKM-Theorie, also der statistischen Theorie unimolekularer Reaktionen von Hinshelwood, Rice, Ramsperger, Kassel und Marcus, und eine ausführliche Sammlung experimenteller Daten klassischer Reaktionen. Unter den seinerzeit verfügbaren Darstellungen war er die detaillierteste Anleitung zu einer RRKM-Analyse in der Praxis. Wegen seines frü-

hen Erscheinungsjahres fehlten ihm jedoch viele neuere Aspekte.

Thermische und nichtthermische unimolekulare Reaktionen werden sehr häufig unter Bedingungen studiert, unter denen zwischenmolekularer Energieaustausch in Stoßen die Geschwindigkeit der Reaktionen ausschließlich oder zumindest teilweise bestimmt. Rückblickend überrascht, daß diesem Prozeß so lange so wenig Aufmerksamkeit geschenkt wurde. Die Neuauflage des Buches beseitigt diesen Mangel, indem Beschreibungen mit Mastergleichungen aufgenommen werden. Trotzdem hätte der Prozeß der Energieübertragung zum besseren Verständnis eine noch ausführlichere Darstellung verdient.

Das Buch befaßt sich ausführlich mit neuen Zählalgorithmen für Zustandsdichten und Zustandszahlen, so daß sich die statistischen Analysen der RRKM-Theorie nachvollziehen lassen. Die Behandlung von Reaktionen mit starren aktivierte Komplexen, der sich die klassische RRKM-Theorie vor allem widmete, kann so auch vom Anfänger leicht erlernt werden. Die Neuauflage geht ausführlich auch auf Reaktionen mit lockeren aktivierte Komplexen ein. Die verschiedenen Variationsverfahren der Theorie des Übergangszustandes werden einander in gelungener Weise gegenübergestellt. Umso überraschender ist es, daß die Phasenraumtheorie, also der Grenzfall völlig lokaler Übergangszustände, für den man das Problem der Drehimpulserhaltung bei der Reaktion auf einfache Weise korrekt behandeln kann, praktisch vollständig übergangen wird. Bei Betrachtung auch dieses Grenzfalles könnte man das ausführlich dargestellte statistische Modell adiabatischer Reaktionskanäle leichter verstehen.

Das Buch bietet eine Fülle von Hinweisen auf die aktuellen Arbeiten des Gebietes, sowohl in der Theorie wie in Experimenten. Es belegt die heute möglichen Untersuchungen mit anschaulichen Beispielen und bietet damit eine vorzügliche Einführung für den Anfänger und viele Anregungen für den Fortgeschrittenen. Es bewahrt den Geist des alten „Robinson-Holbrook“ und bringt ihn gleichzeitig auf einen modernen Stand. Wenn das Buch ganz neu geschrieben worden wäre, hätte man vielleicht die Gewichte anders gesetzt. So hätte man den Zerfällen von Molekülen, den komplex-bildenden bimolekularen Reaktionen von neutralen oder auch von geladenen Teilchen, Trajektorienrechnungen oder den heute möglichen Berechnungen adiabatischer Reaktionskanäle, anharmonischen Zustandsdichten und – wie

oben bereits gesagt – der Phasenraumtheorie auf Kosten der klassischen RRKM-Theorie mehr Platz einräumen können. Aber das hätte den Rahmen der vorliegenden Monographie gesprengt. So ist es bei der gut gelungenen Aktualisierung des ursprünglichen Konzeptes geblieben. Das Buch eignet sich vorzüglich als weiterführende Lektüre für fortgeschrittene Studenten und für Reaktionskinetiker, die sich mit Gasreaktionen befassen wollen.

Jürgen Troe

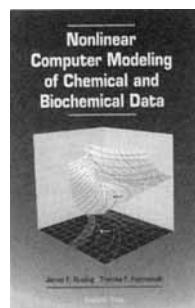
Institut für Physikalische Chemie
der Universität Göttingen

Nonlinear Computer Modeling of Chemical and Biochemical Data. Von J. F. Rusling und T. F. Kumasinski. Academic Press, San Diego, 1996. 268 S., geb. 64.95 \$. – ISBN 0-12-6044-90-2

Bedingt durch die steigende Leistungsfähigkeit moderner Rechner, gehört die digitale Speicherung von Meßdaten inzwischen zum Alltag experimenteller Praxis. Auch bei der Auswertung verläßt man sich zunehmend auf kommerziell angebotene Software. Allerdings wird man seltener fündig, wenn nichtlineare Vorgänge analysiert werden sollen. Hier bedarf es neben geeigneten Verfahren zur Modellierung komplexer Prozesse vor allem der Methoden der nichtlinearen Regression.

Chemiker haben sich mit diesen Problemen bislang nur am Rande beschäftigt. Es ist deshalb sehr zu begrüßen, daß zwei Autoren, die langjährige Erfahrungen auf dem Gebiet der Chemometrie besitzen, nun den Versuch unternommen haben, fortgeschrittene Studenten der Chemie, aber auch Praktiker in die Prinzipien der nichtlinearen Regression einzuführen und an Hand von zahlreichen Beispielen deren großen Anwendungsbereich zu dokumentieren.

Didaktisch recht geschickt werden zunächst die Grundlagen der linearen Regression vorgestellt und, darauf aufbauend, die Rechenmethoden der nichtlinearen Regression erläutert. Bei einem Gesamtumfang von 270 Seiten bleibt allerdings mit 70 Seiten für diesen ersten Teil des Buches kein Raum für Details. Auch die marginal eingebauten Pro-



grammabschnitte erlauben es dem am Computer weniger erfahrenen Leser nicht, eigene Auswertungsprogramme für experimentelle Daten zu schreiben. Dennoch sind die hier vermittelten Informationen für das Verständnis von Regressionsrechnungen sehr hilfreich und erleichtern in jedem Fall die Auswertung.

Im zweiten Teil des Bandes wird eine Fülle von experimentellen Beispielen aus dem Forschungsbereich der Autoren vorgestellt. Die Ergebnisse einschließlich der Diskussion zeigen, wie man aus gemessenen Rohdaten moderner instrumenteller Methoden zuverlässige Aussagen über Parameter von untersuchten Systemen erhält. Der Bogen spannt sich hierbei von der Spektroskopie (NMR, IR) über die Elektroanalytik bis hin zur Chromatographie und anderen analytischen Verfahren. Mit Ausnahme der elektrochemischen Untersuchungen werden zwar vorzugsweise Anwendungen auf biochemische Fragestellungen diskutiert; die meisten dieser Probleme lassen sich aber verallgemeinern, so daß sie leicht auf andere Gebiete der Chemie übertragbar sind.

Bei der Diskussion der Beispiele wird jedoch nicht immer eindeutig klar, daß der erste Schritt zur Analyse von Daten in der Modellierung des Experiments besteht. Und dies ist sehr aufwendig, wenn sich das Experiment nicht über einen analytischen Ansatz, sondern nur durch digitale Simulation beschreiben läßt. Ist die Qualität der Simulation unzureichend, kann auch die Regression keine zuverlässige Auswertung liefern.

Das Buch ermutigt dazu, sich in die komplexe Materie der Chemometrie einzuarbeiten. Es ist nützlich für alle, die Meßdaten interpretieren und sich Hintergrundwissen über Auswertungsmethoden verschaffen wollen. Die von den Autoren angesprochene Möglichkeit, selbständig Modelle und Programme zu entwickeln, ist allerdings kaum gegeben.

Jürgen Heinze

Institut für Physikalische Chemie
der Universität Freiburg

The Responsible Conduct of Research. Von D. Beach. VCH Verlagsgesellschaft, Weinheim, 1996. 162 S., Broschur 48.00 DM. – ISBN 3-527-29333-7

Wäre es nicht sinnvoll – um des wissenschaftlichen Fortschrittes willen –, beispielsweise die Atomkoordinaten einer so eben aufgeklärten Proteinstruktur in eine Datenbank einzugeben, um sie auch anderen Forschern zugänglich zu machen?

Oder sollte man nicht besser darauf verzichten, seinen Artikel über die Synthese eines lange gesuchten Zielmoleküls noch rasch in einer Zeitschrift mit kurzen Publikationszeiten veröffentlichen, nachdem man vom Gutachter eines „langsameren“ Journals erfuhrt, daß eine andere Gruppe dieses Synthesenziele ebenfalls vor kurzem erreicht hat? Es gibt solche unmoralischen – aber nicht illegalen – Handlungsweisen. Sie sind selten (noch seltener ist wirklicher Betrug), aber es gibt sie. Interessant ist die Hybris, die sich hinter meiner Frage „Wäre es nicht sinnvoll?“ verbirgt, denn damit setze ich voraus, daß Ethik logisch ist.

Ethik ist nicht logisch, und Wissenschaftler ist Moral nicht angeboren (im übrigen auch nicht Logik). Die Wissenschaft ist eine außerordentlich erfolgreiche soziale Struktur mit der Aufgabe, Zusammenhänge zu erforschen. Ihre Akteure sind neugierige, intelligente, aber nicht unfehlbare Menschen, die alle Hilfe brauchen, die sie bekommen können, um moralisches Verhalten zu erlernen – von ihren Eltern, Freunden, religiösen Ratgebern, Lehrern, und auch aus Büchern. Zusätzlich müssen sie miteinander reden; nicht so sehr über allgemeine moralische Prinzipien, sondern über spezifische Einzelheiten, oft auch Unerfreuliches. Schwierige ethische Probleme führen häufig zur Kollision der Wertvorstellungen beteiligter Personen. So wird die Moral unvermeidlich durch das Gespräch mit anderen geprägt.

Enthüllungen der Presse und das Interesse von Regierungen an spektakulären Fehlitten der Wissenschaft (die meisten Forscher finden beides übertrieben, wenn nicht gar boshaft) haben endlich zu einigen argumentativ sorgfältig ausgearbeiteten Abhandlungen über Ethik und Verantwortung in der Wissenschaft geführt. Uns liegen mittlerweile auch Arbeiten über die Aufgabe von Regierungen (in manchen Bereichen) zur Erstellung von strukturierten Anleitungen sowie das eine oder andere Buch für Wissenschaftler vor.

Das Buch von Doré Beach und Coautoren spricht in der Tat die meisten wichtigen Fragen der Ethik in der wissenschaftlichen Forschung an. Die Art und Weise, wie das geschieht, finde ich allerdings zum Teil unbefriedigend; bevor ich aber näher darauf eingehe, lassen Sie mich kurz etwas zum Inhalt dieses Buches sagen. Es enthält zehn angemessen kurze Kapitel. Die Themen reichen von einer Definition des Begriffes „Ethik“ und einem kurzen Abriß des Stellenwertes der Ethik in der Philosophie über ethische Fragen des Publizierens und der gesetzlichen Grundlage zum Schutze geistigen Eigentums bis hin