

(MWG-Ausdrücke und Stoffmengenbilanzen) aufgestellt. Mit Hilfe eines übersichtlichen Flußdiagramms wird dann das Programm in BASIC geschrieben, die zugehörigen Erläuterungen sollten dabei selbst absoluten Programmier-Laien das Verständnis wie auch die Erstellung eigener kleiner Programme zu analogen Problemen ermöglichen. Die vorgestellten Beispiele entstammen sämtlich dem Basiswissen der Allgemeinen und Anorganischen Chemie, wobei der Schwerpunkt, ganz dem üblichen Stoff der ersten Semester entsprechend, auf analytisch relevanten Fragestellungen liegt. Acidimetrische Titrationen und eine Redoxtitration werden ebenso behandelt wie die Fällungstitrationen der Silberhalogenide und deren Trennung durch Komplexbildung, aber auch das Wassergasgleichgewicht, der thermische Zerfall von gasförmigem HI und die Zusammensetzung von Phosphor- bzw. Schwefeldampf werden temperaturabhängig berechnet.

Die zugrundeliegende Thermodynamik ist nur äußerst kurz zusammengefaßt (insofern ist der Untertitel „Grundlagen · Berechnungen · Tabellen“ etwas irreführend), und auch der für die Aufstellung der Reaktionsgleichungen nötige chemische Sachverstand wird vorausgesetzt. Das Buch versteht sich demnach nicht als ein Ersatz für die entsprechenden Lehrbuchtexte der Allgemeinen Chemie, sondern als eine Ergänzung, die sich auf die Vermittlung der iterativen Berechnung von Gleichgewichtskonzentrationen konzentriert. Ein weiterer Schwerpunkt ist der ausführliche Tabellenanhang mit thermodynamischen Daten, Löslichkeitsprodukten und Komplexbildungskonstanten, welcher beinahe die Hälfte des Seitenumfangs ausmacht.

Diesem ausgezeichnet aufgemachten Buch, zu dem es keine mir bekannte Entsprechung gibt, sind viele Leser zu wünschen. Beispiele, Niveau und didaktische Aufbereitung sind auf Studenten der ersten Semester ausgerichtet, allerdings gehört die vorgestellte Methodik nicht zum üblichen Themenkanon der Allgemeinen Chemie, so daß der Anreiz zum Durcharbeiten eines solchen Buches gering sein dürfte. Eigentlich ruft dieses lehrreiche Verfahren, welches auch kompliziertere Gleichgewichtssysteme durch leicht zu berechnende Graphiken veranschaulichen kann, nach einer entsprechenden Ergänzung des Lehrstoffs im Grundstudium, aber die allerorts engen zeitlichen Vorgaben im Zuge der Verkürzung des Chemiestudiums werden dies wohl verhindern. Dabei wäre dem chemischen Verständnis durch eine solche Neuerung durchaus ein Dienst erwiesen, denn der chemische

Sachverstand steckt schließlich im Aufstellen der Reaktionsgleichungen und nicht im anschließenden, mit Fehlerquellen gespickten Auffinden der algebraischen Lösung. Gleichzeitig müßten wohl auch die Unterrichtsformen angepaßt werden, da ein Frontalunterricht mit Tafel und Kreide diese Methode ganz offensichtlich nicht angemessen vermitteln kann; für entsprechende Seminare dürfen jedoch an den meisten Hochschulen Computer-Pools und Lehrpersonal knapp sein. Auf eine Klausurfrage wie „Erstellen und testen Sie ein Programm zur pH-Wert-Berechnung für eine dreiprotonige Säure“ werden die meisten Studenten also wohl noch lange warten müssen. Eigentlich schade.

Nikolaus Korber

Institut für Anorganische Chemie  
der Universität Bonn

**Introduction to Molecular Dynamics and Chemical Kinetics.** Von G. D. Billing und V. Mikkelsen. John Wiley & Sons, 1996. 104 S., geb. 40.00 £.— ISBN 0-471-12739-6

Das Buch erhebt auf der Rückseite des Einbandes den Anspruch, es sei „the most complete introduction available to molecular dynamics and the calculation of rate of reaction“. Im Vorwort werden Ausgangspunkt und Ziel erläutert: Die meisten Standardwerke der Physikalischen Chemie skizzieren bloß die Grundideen der reaktiven Streuung und der Theorie des Übergangszustandes. Hier sollten zunächst diese Gebiete genauer dargestellt werden. Die Besonderheit dieses Buches sei, daß zusätzlich die Konzepte der Moleküldynamik und Theorien für Reaktionen in Lösung entwickelt würden. Damit sollten schließlich Reaktionen in der Gasphase, auf Oberflächen und in Lösung im Zusammenhang gesehen werden können.

In der Tat fehlt bislang eine orientierende Übersicht über die wesentlichen Konzepte zur Dynamik elastischer, inelastischer und reaktiver Stöße, zur Praxis der klassischen Moleküldynamik, zur Theorie des Übergangszustandes und zum stochastischen Einfluß der Lösung. Es gibt exzellente einführende Monographien zu den einzelnen Gebieten. Bevor man sich aber bei der Ausbildung in einzelne Gebiete vertieft, ist es sicherlich sinnvoll, die weite und vielfältige Landschaft der Reaktionsdynamik klar ins Auge zu fassen. Dies ist freilich ein großes Programm für nur ein Semester (diese Einführung entstand anhand von Vorlesungen der Auto-

ren für Studenten der Physikalischen Chemie im dritten Studienjahr), so daß die Durchführung auf die folgenden Punkte wohl nicht verzichten kann: Für jedes Gebiet müssen die Grundideen und das Ziel prägnant dargestellt werden; die wesentlichen Bausteine sollten sauber (und ohne zuviel formalen Ballast) beschrieben und anschaulich vergegenwärtigt werden. Der besondere Reiz und eigentliche Sinn einer Übersicht besteht schließlich darin, daß die Staffelung der Gebiete, ihre Verbindungen und Gemeinsamkeiten sichtbar gemacht werden können.

Mit diesen Erwartungen öffnen wir das Buch und finden 16 Kapitel. Zunächst werden Elemente der reaktiven Streuung behandelt: interaction potentials, relative motion, collisional approach. Es folgen einige Kapitel zur Theorie des aktivierten Komplexes: partition functions, transition-state theory, generalized-transition-state theory, unimolecular reactions. Nun geht es wieder zurück zur Zeitabhängigkeit: classical dynamics, nonadiabatic transitions. Diese Themen werden auf 59 Textseiten behandelt. Danach folgt ein etwas größerer Teil (auf 63 Textseiten) über Oberflächen und besonders zu Reaktionen in Lösung: surface kinetics, chemical reactions in solution, solvent effects, models for reactions in solution, Kramers' theory, electron-transfer. Zusätzlich enthält jedes Kapitel eine kurze, aber ausreichende und meistens treffende Literaturliste, sowie eine Reihe von Aufgaben. In einem Appendix folgen einige Integrale und Funktionen, Erläuterungen zur Laplace-Transformation, Grundzüge der statistischen Mechanik im Gleichgewicht sowie Notizen zur dielektrischen Polarisation und Solvatation. Abschließend werden Hinweise zur Lösung der Aufgaben gegeben. Insgesamt handelt es sich offenbar um knappe Vorlesungsnotizen; um Stützpunkte zu einer Folge von Schritten durch die Gebiete, wobei einzelne Schritte sogar als Aufgabe vergeben werden.

Leider wird die innere Ordnung selten sichtbar, was bei der äußerst knappen Darstellung zu Verwirrung führen kann. Als erstes Beispiel betrachten wir das Kapitel zur relativen Bewegung zweier Stoßpartner: Hier werden einleitend der *Gesamtimpuls* und die *Relativgeschwindigkeit* definiert. Damit werden die Geschwindigkeitsvektoren der Partner dargestellt. Einführung in die kinetische Energie erzeugt einen Term, der sich später als kinetische Energie des Massenzentrums herausstellt. Erst dann wird der relative Ortsvektor und der Ortsvektor für das Massenzentrum definiert. Aus der einleitenden Darstellung des Transla-

tionsimpulses eines Teilchens anhand von Gesamt- und Relativimpuls folgt nun per zeitlicher Ableitung die vom Abstand abhängige Kraft (hier erstmals erwähnt, wobei implizit die Abwesenheit äußerer Felder vorausgesetzt wird) und damit die Bewegungsgleichung für den relativen Ortsvektor. Weiter geht es mit der kinetischen Energie für die Relativbewegung, welche durch zeitliche Änderung von Abstand und Winkel beschrieben wird. Die kommentarlose Einführung einer gewissen Anfangsbedingung für letztere, mit einem Impact-Parameter, ergibt eine neue Form. Darin kann ein Ausdruck zu einem  $L$  zusammengefaßt werden, was der Betrag des orbitalen Drehimpulses sei. Schließlich wird ein effektives Potential formuliert. So weit, so verwirrend; hier handelt es sich aber eigentlich um folgende Schritte: Darstellung von kinetischer und potentieller Energie in Labor-Orten und -Geschwindigkeiten (Lagrange-Formalismus); Transformation auf das Massenzentrum und Separation seiner kinetischen Energie; Transformation auf den relativen Ort und seine Geschwindigkeit, weiter auf Polarkoordinaten und Winkelgeschwindigkeit; Bildung des (konjugierten) Orbital-Drehimpulses  $L$ ; damit Fassung der Winkelgeschwindigkeit und diesbezüglich Übergang zum Hamilton-Operator; Erhalt von  $L$  und seine Bestimmung aus den Anfangsbedingungen; schließlich effektives Potential.

Als zweites Beispiel betrachten wir die Reihenfolge, mit der der Einfluß der fluktuierenden Kräfte durch das Lösungsmittel auf eine chemische Reaktion entwickelt wird: Zunächst wird der Diffusionskoeffizient  $D_i$  eingeführt über die Stromdichte für die Teilchen  $i$ :  $J_i = -C_i D_i \text{ grad } \mu_i / RT$ . Daraus wird dann das erste Ficksche Gesetz gewonnen. Es folgt ein Abschnitt über Diffusion als Random Walk, in dem freilich unerwähnt bleibt, daß hier die Übergangswahrscheinlichkeiten zu gleichen Teilen auf die nächsten Nachbarn verteilt ist. Die Identifikation des Diffusionskoeffizienten müßte eigentlich auf das zweite Ficksche Gesetz warten, welches im nächsten Abschnitt behandelt wird. Ein Abschnitt über Brownsche Bewegung ist formal gehalten und vom Konzept her schwer zu verstehen. Einen besonderen Umfang nimmt später die Diffusion (von Ort und Geschwindigkeit) in einem Potential ein; es wird sogar die Klein-Kramers-Gleichung für den Brownschen Oszillatator abgeleitet. Beide Themen erschließen sich leichter auf den ersten fünf Seiten von Kramers fundamentaler Arbeit in *Physica* **1940**, 7. Weiter vermissen wir die resultierende Beschreibung für große Reibungs-

koeffizienten (Smoluchowski-Gleichung), denn damit könnte ja der Bogen zum zweiten Fickschen Gesetz geschlagen werden.

Auch die Abbildungen tragen nicht immer zum Verständnis bei. Im Kapitel über „Klassische Dynamik“ finden wir Koordinatensysteme zur Beschreibung der Relativbewegung von B-C gegenüber A. Ein Koordinatensystem hat seinen Ursprung in A; hierin sind das Massenzentrum von B-C und der relative Ortsvektor dargestellt. Es gibt aber noch ein zweites Koordinatensystem im Massenzentrum von B-C, und die so beschriebenen Orte erhalten eine besondere Notation. Das zweite System ist aber an dieser Stelle völlig unnötig! – In einer anderen Abbildung dieses Kapitels soll gezeigt werden, wie sich die Orte transformieren, wenn das Koordinatensystem vom Massenzentrum von B-C auf das von A-C verlagert wird. In diesen zwei Fällen sollte zweckmäßig die relative Anordnung von A, B und C gleich sein. Gezeigt werden aber zwei verschiedene Konfigurationen! – Im Kapitel über „Chemische Reaktionen in Lösung“ ist ein „Brownsches Teilchen“ dargestellt. Es besteht hier aus einer Hantel innerhalb eines Rahmens und ist umgeben von konzentrischen Ringen, deren Bedeutung noch nicht geklärt werden konnte. – Dies sind nur einige Beispiele von vielen nichtssagenden, teilweise irreführenden oder schlicht falschen Bildern.

Insgesamt gewinnt man den Eindruck, als ob das Buch in einer eigentümlichen Weise vorwärts springend, dann wieder rückwärts schreitend geschrieben worden wäre. Außerdem enthält es zahlreiche kleine Fehler. Deshalb ist das Durcharbeiten unnötig mühsam. Es ist eher unwahrscheinlich, daß dieses Buch zur Begeisterung des Nachwuchses für die mikroskopische Reaktionsdynamik und chemische Kinetik beiträgt.

N. P. Ernsting, N. Heineking  
Institut für Physikalische  
und Theoretische Chemie  
Humboldt-Universität, Berlin

**Lackharze. Chemie, Eigenschaften, Anwendung.** Herausgegeben von D. Stoye und W. Freitag. Carl Hanser Verlag, München, Wien, 1996. 477 S., geb. 198.00 DM.—ISBN 3-446-1745-3

Das vorliegende Buch knüpft an die Tradition des von Wagner/Saxx herausgegebenen Standardwerks Lackkunstharze an, das bis 1971 in fünf Auflagen erschien. Das Anliegen der Herausgeber, die mo-

dernen Entwicklungen auch unter Berücksichtigung ökologischer Gesichtspunkte, in einem grundlegenden Werk über Lackharze niederzulegen, ist gelungen. Das Buch ist wegen seiner gut ausgewogenen Darstellung und durch die Beschränkung auf das Wesentliche, ohne dadurch an Verständnis zu verlieren, einem breiten Leserkreis (Chemiker, Ingenieure und Anwendungstechniker) zu empfehlen. Beim Lesen spürt man das Bemühen der 17 Autoren, dem Leser die Lackharze in ihrer Vielfalt und Bedeutung näher zu bringen und Zusammenhänge darzustellen. Der Arbeit der Herausgeber ist es zu verdanken, daß das Buch trotz der Vielzahl von Autoren aus einem Guß in Text und Gestaltung erscheint.

Das Anliegen, nämlich grundlegendes Wissen und spezielle Stoffkenntnisse zu vermitteln, teilt das Buch in zwei ungleich große Abschnitte. In den Kapiteln eins bis fünf sind die Wege zum Makromolekül und die besonderen Eigenschaften der Polymere ausreichend beschrieben. Die gebildeten Makromoleküle müssen verarbeitet und sollen angewandt werden. Den prinzipiellen Aspekten dieser beiden Fragestellungen widmen sich zwei weitere Kapitel. Insgesamt ist dieser Teil zwar kurz (45 Seiten) und prägnant, aber durch die Angabe von einführender und vertiefender Literatur, wird dem an einem speziellen Problem interessierten Leser der Zugang zu weiteren Erkenntnissen gewiesen. Der weitaus umfangreichere Teil des Buches ist den stoffspezifischen Darstellungen gewidmet. Hier wiederum nimmt naturgemäß die Beschreibung der durch Polykondensation gebildeten Lackharze (unter anderem Polyester-, Alkyd-, Amino-, Phenolharze, Polyamide) vor den Polyaddukten (Polyurethane, Epoxidharze) und den Polymerisaten den meisten Platz ein. In einem gesonderten Kapitel werden die nicht eindeutig in das Ordnungsschema einzuordnenden Lackharze (unter anderem Siliconharze, Wasserglas, modifizierte Naturprodukte) beschrieben. In der Darstellung fehlen weder die klassischen, seit langen Jahren genutzten Polymere, noch die Entwicklungen jüngerer Zeit. Der Begriff der Lackharze wird sehr weit gefaßt und so werden nahezu alle Stoffe angesprochen, auch wenn sie in der speziellen Anwendung nur eine untergeordnete Rolle spielen. Reichlich werden Anwendungsbeispiele angeführt und Vorteile und Nachteile besprochen. Die Übersicht von Herstellern und Handelsnamen am Schluß der Behandlung eines Stoffes oder einer Stoffgruppe, wird der Leser dankend zur Kenntnis nehmen; gleiches gilt für die vielen Literatur- und Patentzitate. Die Anwendung der Lackharze verlangt