

lung bereits Anfang der neunziger Jahre abgeschlossen wurde. Die Welt der biomedizinischen Forschung, insbesondere die der pharmazeutischen Industrie, hat sich seitdem einschneidend verändert. Einige Schlußfolgerungen aus dieser Studie sind daher zwangsläufig durch die rasche Entwicklung auf diesem Gebiet überholt. Abschließend ist ein warnendes Wort bezüglich des Buchtitels angebracht. Er wirkt wie ein Köder, allerdings mit wenig Fleisch am Haken. Weder werden die entscheidenden Erfolgsfaktoren moderner multidisziplinärer biomedizinischer Forschung hier umfassend behandelt, noch werden Definition und Ausmaß pharmazeutischer Innovation mehr als oberflächlich besprochen. Ein zurückhaltender Titel wäre zwar weniger attraktiv, aber besser gewesen und hätte die Leser vermutlich eher zufrieden gestellt.

Klaus Müller

F. Hoffmann-LaRoche AG  
Pharma Research New Technologies  
Basel (Schweiz)

**Verhalten und Abbau von Umweltchemikalien, physikalisch-chemische Grundlagen.** Von W. Klöffner. Ecomed, Landsberg, 1996. 386 S., geb. 78.00 DM.—ISBN 3-609-73210-5.

Umweltwissenschaften, entweder auf hohem wissenschaftlichen Niveau oder praxisnah für den Anwender; zwischen Scylla und Charybdis bewegt sich das Gebiet. Das Buch versucht einen Brückenschlag. In bestimmten Systemen der Umwelt, wie beispielsweise in dem der Atmosphäre können die dort ablaufenden Prozesse zumindest in der Gasphase physikalisch und chemisch exakt beschrieben werden. In den beiden anderen Umweltkompartimenten von Pedosphäre (Boden) und Hydrosphäre (Wasser) ist das infolge der komplexen Zusammensetzung dieser Matrices wesentlich schwieriger und man ist auf empirische Verfahren angewiesen. Das Buch ist die erste deutschsprachige Monographie zum Thema Eintrag, Verteilung und Abbau von Chemikalien in der Umwelt, nachdem 1993 ein englischsprachiges Werk zum Thema von einer schweizer Autorengruppe erschienen ist. Unter Chemikalien werden anthropogene Substanzen, sogenannte Xenobiotika verstanden, die entweder im industriellen Maßstab produziert oder als natürlich vorkommende Produkte (z.B. Erdöl) in die Umwelt gebracht werden. Das Buch beschreibt das „Schicksal“ von Substanzen in der Umwelt und zum

Schluß wird der aktuelle Stand der Modellierverfahren behandelt.

Im ersten Teil „Transferprozesse und Verteilung zwischen den Kompartimenten“ werden die fünf substanzspezifischen, umweltrelevanten Eigenschaften wie Dampfdruck, Wasserlöslichkeit, Henry-Konstante Adsorptionskonstante und K<sub>ow</sub>-Wert als thermodynamische Parameter neben der Diffusionskonstanten als kinetische Größe beschrieben. Je nach Substanzart sind Säure- und Base-Konstanten sowie die Oberflächenspannung für das Umweltverhalten wichtig. Es werden die von der OECD (Organization for Economic Co-operation and Development) vorgeschriebenen Meßverfahren vorgestellt. Die Anwendung dieser Eigenschaften zur Beschreibung der Transferprozesse und der Verteilung werden in klaren und anschaulichen Bildern an gut ausgewählten Substanzbeispielen vorgeführt. Der interessierte Leser kann sich mit Hilfe von 272 angegebenen Literaturstellen weiter in spezielle Probleme einarbeiten. – Leider vermißt man Hinweise für die Gründe der großen Schwankungsbreiten der in der Literatur angegebenen thermodynamischen Größen von bestimmten Stoffen. Beispielsweise können die in aktuellen Kompendien angegebenen Werte für den Dampfdruck und die Wasserlöslichkeit von schwerflüchtigen und schwerlöslichen Stoffen um ein bis zwei Zehnerpotenzen voneinander abweichen. Der Grund: es handelt sich nicht um Eigenschaften isolierter Moleküle, sondern Ensemble-Eigenschaften von Molekülverbänden in kondensierter Phase. Weil diese Größen meßtechnisch oft schwierig zugänglich sind (eine Einkristall-Röntgenstrukturanalyse ist häufig einfacher zu erhalten), wurden Inkrement-Methoden von Hansch entwickelt, deren Behandlung man in der Monographie vermißt. In einer Neuauflage könnte man auch die in Deutschland produzierten Arten und Mengen von industriellen Produkten sowie die Gesetze, die die Einführung in die Umwelt regeln, ergänzen, wobei auch ein Hinweis auf die Problematik der umweltrelevanten Altstoffe nützlich wäre.

Im zweiten Teil „Abbau- und Transformationsprozesse“ werden die physikalischen und chemischen Prozesse beschrieben, die über Zwischenstufen zur Mineralisierung (Oxidation zu Kohlenstoffdioxid und Wasser) der eingebrachten organischen Substanzen in den drei Umweltkompartimenten führen. Dabei wird zwischen leicht-, bedingt- und nicht-abbaubaren (persistennten) Substanzen unterschieden. Die persistenten Verbindungen sind die Problemstoffe unserer

Umwelt, wenn es sich um ökotoxisch bedenkliche Verbindungsklassen handelt. Eine Reihe von polyhalogenierten Verbindungen, wie zum Beispiel die chlorierten Dibenzodioxine und -furane und die polychlorierten Biphenyle haben in der Umwelt kaum eine Senke, außer durch Reaktion mit OH-Radikalen in der Atmosphäre und in Oberflächengewässern. Diese biologisch schwer abbaubaren Verbindungen können sich daher in biotischen Systemen anreichern. Dagegen kann die Mehrzahl der anthropogenen Substanzen biologisch und chemisch abgebaut werden. Das Buch zeigt auf übersichtliche und informative Weise die verschiedenen Möglichkeiten des biologischen und abiotischen Abbaus von industriell hergestellten organischen Substanzen. Die oxidativen Abbauwege in der Atmosphäre und der Hydrosphäre mit reaktiven Spurenstoffen wie OH-Radikalen, Singulett-Sauerstoff, Ozon und NO<sub>3</sub> werden ausführlich geschildert. Als kompetentem physikalischen Chemiker gelingt es dem Autor, die verschiedenen zu Grunde liegenden kinetischen Gleichungen der Abbauwege in Form von Ableitungen und anschaulichen Abbildungen aufzuzeigen. Hinweise auf die zu Grunde liegenden Reaktionsmechanismen, die zum Verständnis nützlich wären, fehlen aber leider. Beispielsweise spielt die Hydrolyse von primären und tertiären Alkylchloriden eine wichtige Rolle beim hydrolytischen Abbau bestimmter Substanzklassen in der Hydrosphäre. Die Wissenschaftler der angewandten Umweltchemie nutzen nicht die den Organikern geläufigen Begriffe wie S<sub>N</sub>1- und S<sub>N</sub>2-Mechanismus, sondern beschreiben beide Prozesse ausschließlich nach formalen Gesichtspunkten. Mit einem ausführlichen Literaturverzeichnis von über 385 Zitaten kann sich der Spezialist jedoch weiter über Einzelheiten informieren.

Die beiden ersten Teile des Buches sind notwendig, um dann die Methoden der Modellierung von Umweltchemikalien im dritten Teil zu verstehen. Der Nichtspezialist wird anhand von gut ausgewählten Tabellen, Diagrammen und Rechenbeispielen didaktisch geschickt in die verschiedenen Methoden der Modellierung eingeführt. Dabei wird auf die praxisnahe Anwendung der Verfahren besonderer Wert gelegt. Nach der Expositionabschätzung mittels des Modells EMSA werden die multimedialen Kästchenmodelle entwickelt. Ein besonderes Gewicht haben die von Mackay entwickelten Fugazitätsmodelle, die gut verständlich dargestellt werden. Es schließt sich eine Besprechung von speziellen Methoden (EXAMS, ABIWAS und

EXWAT) an. Dieser Teil hat kleinere Mängel. Bei der Einführung in die Problematik hätte sich der Begriff „evaluative Modelle“ angeboten. Warum benutzt man bei den Mackay Modellen die Fugazität als Zustandsvariable, während die anderen Modelle die Konzentration als Parameter benutzen? Auch ein Verweis auf bestehende Modelldatenbanken wäre sehr nützlich gewesen. Zu diesem Teil findet man ebenfalls 129 Literaturverweise.

Resümee: Es ist dem Autor gelungen, einen sehr breiten Bereich der Umweltchemie in überschaubarer und übersichtlicher Form darzustellen. Einige Angaben aus der Literatur sollten kritisch überarbeitet werden. Wenn in einer Neuauflage die Fehler korrigiert, die Literaturzitate aktualisiert sowie das Stichwortverzeichnis ergänzt werden, kann man die Monographie als Lehrbuch im Rahmen eines umweltchemischen Studiengangs sehr empfehlen, auch in Hinblick auf das gute Preis-Leistungs-Verhältnis.

Dieter Lenoir

Institut für ökologische Chemie  
des GSF Forschungszentrums  
für Umwelt und Gesundheit,  
Neuherberg bei München

**Green Chemistry. Designing Chemistry for the Environment.** Herausgegeben von P. T. Anastas und T. S. Williamson. American Chemical Society, Washington, D. C., 1996. 251 S., geb. 89.95 \$.—ISBN 0-8412-3399-3

1983 wurde in der Zeitschrift *Chemie in unserer Zeit* über ein interessantes Experiment berichtet. Schüler, zwischen 11 und 15 Jahren, von acht Baseler Schulklassen sollten das Thema „Chemie“ bildlich darstellen. Das Ergebnis – wenige Jahre nach dem Unfall von Seveso – war eindeutig: Die große Mehrheit der Kinder fühlte sich und ihre Umwelt von „der Chemie“ bedroht. Diese Kinder sind inzwischen erwachsen und ihre Auffassung von „der Chemie“ hat sich seither sicherlich nicht geändert. Eines ihrer Bilder wirkt wie eine Vorahnung auf die Katastrophe von Bhopal nur ein Jahr später, dem bisher schlimmsten Unfall in der Geschichte der chemischen Industrie. Mehr als 2000 Menschen starben, schätzungsweise 300000 Menschen in einem Umkreis von 10–20 km<sup>2</sup> wurden geschädigt. Eine solche Katastrophe hätte verhindert werden können, wenn bei der Synthese des wichtigen Insektizids Carbaryl das reaktive und hochtoxische Zwischenprodukt Methyl-isocyanat nur *in situ* gebildet und ohne

Isolierung und Zwischenlagerung sofort zum Endprodukt umgesetzt worden wäre.

Der vorbeugende integrierte Umweltschutz wird seither politisch nachdrücklich gefordert – übrigens nicht nur für die chemische Industrie – und langsam auch realisiert. Das geht nicht von heute auf morgen und vor allem nicht ohne Grundlagenforschung. In den USA wurde deshalb 1993 von der National Science Foundation (NSF) und der Environmental Protection Agency (EPA) ein Forschungsförderungsprogramm gestartet, mit dem gezielt Grundlagenforschung zu chemischen Synthesen und Prozessen unter ökologischen Gesichtspunkten gefördert wird. Der vorliegende Band scheint bereits Ausfluß dieses Programms zu sein und basiert auf den Vorträgen eines Symposiums der „Division of Environmental Chemistry“ beim 208. National Meeting der American Chemical Society, Washington, D. C., August 21–25, 1994. Die Herausgeber P. T. Anastas und T. C. Williamson arbeiten beim „Office of Pollution Prevention and Toxics“ der EPA.

Im ersten Kapitel geben die Herausgeber einen Überblick darüber, was umweltverträgliche Chemie – „Grüne Chemie“ wäre im Deutschen politisch belastet – ist: „Simply stated, ‘Green Chemistry’ is the use of chemistry techniques and methodologies that reduce or eliminate the use or generation of feedstocks, products, by-products, solvents, reagents, etc., that are hazardous to human health or the environment.“ Sie verstehen „Green chemistry“ als neues Paradigma, als Herausforderung für jeden Chemiker, sich die Frage zu stellen: „Is the chemistry I am doing the most benign that I can make it?“

Der Band enthält 16 Beiträge von stark unterschiedlichem Charakter. Es gibt Beiträge, die entsprechend der gegebenen Definition faszinierende Beispiele für umweltverträgliche Chemie sind, während andere mehr sondierenden Charakter besitzen. Es ist sicher eine große Herausforderung, den Einsatz von Phosgen als Zwischenprodukt in der chemischen Industrie zu reduzieren und schließlich ganz zu vermeiden. Diesem Thema sind mehrere Beiträge gewidmet. In Kapitel zwei berichten K. Komiya et al. von Asahi Chemical Industry, Japan, über einen neuen Prozeß zur Produktion von Polycarbonaten. Bei diesem Prozeß wird Bisphenol A mit Diphenylcarbonat in der Schmelze vopolymerisiert. Das Vorpolymerisat kann sehr einfach kristallisiert werden und dann erfolgt im Festkörper die Polymerisation zum hochmolekularen Polycarbonat. Das bemerkenswerte an diesem umweltverträglichen Polycarbonatprozeß ist, daß nicht nur der Einsatz von Phosgen son-

dern auch des Lösungsmittels Methylchlorid vermieden wird. Die Qualität des Polycarbonats ist im Vergleich zum Phosgenprozeß höher, und die Produktionskosten scheinen konkurrenzfähig zu sein. Asahi hat weiterhin innovative Nicht-Phosgen Prozesse für Diphenylcarbonat und für alle wichtigen Isocyanate entwickelt.

Eine Carbarylsynthese ohne Phosgen und ohne die Isolierung von Methylisocyanat wird von W. D. McGhee et al., Monsanto, USA, in Kapitel vier beschrieben. Isocyanate werden aus Aminen und Kohlendioxid mit *o*-Sulfonylbenzoësäureanhydrid als elektrophilem dehydratisierenden Agens generiert und *in situ* zu den Produkten umgesetzt. Schließlich wird von F. Rivetti, U. Romano und D. Delle donne von EniChem, Italien, in Kapitel sechs die Synthese von Dimethylcarbonat durch oxidative Carbonylierung von Methanol mit CuCl als Katalysator beschrieben. P. Tundo et al. berichten in Kapitel sieben über die selektive Monomethylierung von Arylacetonitrilen und Arylesigsäureestern mit Dimethylcarbonat als nichttoxischem Methylierungsmittel.

Titanhaltige Zeolithe sind vielversprechende Katalysatoren für Oxidationen mit Wasserstoffperoxid. In Kapitel drei berichten G. Petrini et al. von EniChem, Italien, über einen neuen Prozeß zur Produktion von Cyclohexanonoxim aus Cyclohexanon, Ammoniak und Wasserstoffperoxid mit Titansilicalit als Katalysator, bei dem der Anfall von Ammonsulfat völlig und auch die Emission an SO<sub>2</sub>, NO<sub>x</sub> und NH<sub>3</sub>, die bei den üblichen Prozessen ein großes Problem darstellen, praktisch vollständig reduziert werden. Auch die Epoxidierung von Olefinen mit Wasserstoffperoxid wird mit diesem Katalysator deutlich umweltverträglicher wie M. G. Clerici und P. Ingallina von Eniricerche, Italien, in Kapitel fünf berichten.

Das Versprühen von Farben und Lacken mit überkritischem Kohlendioxid, bei dem völlig auf flüchtige organische Lösungsmittel verzichtet werden kann, ergibt Lackierungen von sehr guter Qualität und wird von M. D. Donohue, J. L. Geiger, A. A. Kiamos, John Hopkins University, Baltimore, und K. A. Nielsen, Union Carbide, in Kapitel zwölf detailliert dargestellt. Überkritisches Kohlendioxid als umweltverträgliches Solvens wird auch von D. A. Morgenstern et al., USA, in Kapitel elf behandelt. Als Beispiele werden die enantioselektive katalytische Hydrierung von Enaminen und die Kopolymerisation von CO<sub>2</sub> mit Epoxiden beschrieben.

Die übrigen Beiträge besitzen mehr sondierenden Charakter. So sind sicher-