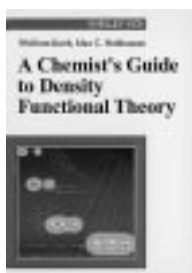


## Wie funktionieren Dichtefunktionale?

**A Chemist's Guide to Density Functional Theory.** Von Wolfram Koch und Max C. Holthausen. WILEY-VCH, Weinheim 2000. XIV+294 S., geb. 198.00 DM.—ISBN 5-527-29918

Während der letzten 15 Jahre hat sich die Quantenchemie von einem Forschungsbereich für eine relativ kleine Zahl von Spezialisten zu einem wichtigen Teilgebiet der chemischen Forschung entwickelt. Zu dieser „Revolution“ haben vor allem die immer häufiger angewandten Methoden der Dichtefunktionaltheorie (DFT) beigetragen. Als beinahe logische Konsequenz wurde 1998 der Nobel-Preis für Chemie an Prof. John A. Pople, einen Pionier der traditionelleren Ab-initio-Methoden, und an Walter Kohn, den Begründer der modernen Dichtefunktionaltheorie, verliehen.

DFT-Methoden stehen heute jedem Chemiker in den meisten allgemein zugänglichen Quantenchemie-Programmpaketen zur Verfügung. Die Zahl der Anwender von DFT-Methoden in der Chemie nimmt stetig zu. Es sind nicht notwendigerweise ausgebildete Quantenchemiker, sondern Leute, die das enorme Potenzial der DFT zur Lösung



chemischer Fragen nutzen wollen. Es existieren zahlreiche hervorragende Lehrbücher über DFT, die sich aber mehr an Physiker oder Spezialisten der Quantenchemie wenden: *Density Functional Theory* von R. M. Dreizler und E. K. U. Gross (Springer, Heidelberg 1995), *Density Functional Theory of Atoms and Molecules* von R. G. Parr und W. Yang (Oxford University Press, New York 1989) und *Energy Density Functional Theory of Many-Electron Systems* von E. S. Kryachko, E. V. Ludena (Kluwer Academic Press, Dordrecht 1990). Es gab jedoch keine Lehrbücher, die Chemikern die DFT und ihre Anwendung auf chemische Probleme nahebringen. Das vorliegende Buch versucht diese Lücke in der Literatur auszufüllen. Um das Fazit dieser Rezension vorwegzunehmen, Koch und Holthausen haben der Chemiker-Gemeinde einen ausgezeichneten Dienst erwiesen.

Das Buch ist in zwei Hauptteile gegliedert, „Part A, The Definition of the Model“ und „Part B, The Performance of the Model“. Die ausgeglichene Kombination dieser beiden Teile macht das Buch für Chemiker so wertvoll. Im Teil A werden die theoretischen Grundlagen der modernen DFT sehr logisch erläutert. Nach einer sehr kurzen Zusammenfassung über die elementare Quantenchemie in Abschnitt 1, werden in Abschnitt 2 wichtige Begriffe wie Elektronendichte, Paardichte sowie Fermi- und Coulomb-Löcher eingeführt. Diese Größen liefern die Basis für einen sehr anschaulichen Zugang zum Verständnis von Elektronenkorrelation und -austausch im ersten Teil des Buchs. Abschnitt 3 ist den frühen Entwicklungen der DFT wie dem Thomas-Fermi-Modell und Slaters  $X_\alpha$ -Näherung gewidmet. Das Hohenberg-Kohn-Theorem wird in Abschnitt 4 behandelt. Der detaillierten Beschreibung des Kohn-Sham-Modells, auf dem alle modernen DFT-Ansätze aufbauen, in Abschnitt 5 folgt eine treffende Beschreibung der

Suche nach Näherungen des mystischen Austausch-Korrelationsfunktionals im Kohn-Sham-Modell in Abschnitt 6. Der Teil A wird durch Abschnitt 7 abgeschlossen, in dem einige wichtige technische Aspekte der Implementierung von DFT-Ansätzen in aktuelle Computerprogramme aufgezeigt werden. Wegen der Anschaulichkeit, mit der die Themen erörtert werden, und der Beschränkung auf wesentliche Punkte ist der Teil A für Nichtspezialisten eine sehr nützliche Einführung in die DFT. Dieser Teil profitiert davon, dass einige der klarsten neueren Ausführungen zur DFT in der Literatur von E. J. Baerends, A. D. Becke und anderen berücksichtigt wurden. Die für Chemiker besonders interessante Frage, ob die Kohn-Sham-Orbitale als Grundlage für die Interpretation der elektronischen Struktur dienen können, wird in Abschnitt 5.3.3 in überzeugender Weise erörtert.

Teil B, für die Zielgruppe des Buchs ebenso wichtig wie Teil A, beschäftigt sich mit der Genauigkeit, die zurzeit in DFT-Rechnungen erzielt werden kann. Besonders die Leistung des verfügbaren Austausch-Korrelationsfunktionals für Berechnungen vielfältiger, den Chemiker interessierender Größen wird eingehend diskutiert. Dazu wurden die Ergebnisse unzähliger systematischer Studien, die in den letzten Jahren durchgeführt wurden, zusammengetragen. Molekülstrukturen und Schwingungsfrequenzen werden in Abschnitt 8 behandelt, während sich die Autoren in Abschnitt 9 mit relativen Energien und Thermochemie befassen. Hier wird nicht nur auf Atomisierungsenergien und Bindungsstärken, sondern auch auf Ionisierungsenergien, Elektronenaffinitäten und Anregungsenergien eingegangen. Die folgenden Abschnitte sind den elektrischen Eigenschaften (Abschnitt 10) sowie den magnetischen Eigenschaften wie NMR-chemischen Verschiebungen, Spin-Spin-Kopplungskonstanten,  $g$ -Tensoren und Hyperfeinkopplungskonstan-

Diese Rubrik enthält Buchbesprechungen und Hinweise auf neue Bücher. Buchbesprechungen werden auf Einladung der Redaktion geschrieben. Vorschläge für zu besprechende Bücher und für Rezensenten sind willkommen. Verlage sollten Buchankündigungen oder (besser) Bücher an die Redaktion Angewandte Chemie, Postfach 101161, D-69451 Weinheim, Bundesrepublik Deutschland senden. Die Redaktion behält sich bei der Besprechung von Büchern, die unverlangt zur Rezension eingehen, eine Auswahl vor. Nicht rezensierte Bücher werden nicht zurückgesandt.

ten (Abschnitt 11) gewidmet. Wasserstoffbrückenbindungen und schwach gebundene Systeme werden in Abschnitt 12 behandelt. Im abschließenden Abschnitt 13 werden die Möglichkeiten erörtert, durch DFT-Ansätze chemische Reaktivitäten, insbesondere Aktivierungsbarrieren zu berechnen. Beispiele hierfür stammen vornehmlich aus der organischen Chemie, die  $H_2$ -Aktivierung durch  $FeO^+$  wird jedoch ebenfalls behandelt. In diesen Abschnitten werden die Anwendungsbreite, aber auch die Grenzen der aktuellen DFT-Modelle sorgfältig und deutlich aufgezeigt. Die ungeheure Menge an statistischen Vergleichen der durch verschiedene DFT-Rechnungen erhaltenen Daten, die im Teil B zusammengestellt wurden, mag den Leser auf den ersten Blick erschrecken. Es ist jedoch einleuchtend, dass eine vernünftige Anwendung der DFT gegenwärtig stark von solchen Vergleichen abhängig ist. Da es nicht möglich ist, das exakte Austausch-Korrelations-Funktional der Kohn-Sham-Theorie systematisch anzunähern, hat die aktuelle DFT einen nicht unwesentlichen semiempirischen Charakter. Andererseits kann man behaupten, dass sie bei weitem die erfolgreichste „semi-empirische“ quantenchemische Theorie ist. Deshalb ist es für einen Chemiker, der DFT-Methoden anwendet, zwingend notwendig, sich etwas Hintergrundwissen über die Verdienste und Unzulänglichkeiten der verwendeten Funktionale anzueignen. Die ausführlichen Datenvergleiche im Teil B sollten dem Nichtexperten helfen, eine geeignete Methode für die Lösung eines bestimmten chemischen Problems auszuwählen.

Was fehlt in diesem Buch? Einige speziellere Merkmale der DFT werden nicht angesprochen. Beispielsweise werden die DFT-basierte Herleitung qualitativer chemischer Begriffe wie Elektro negativität oder Härte nach Parr und die topologische Analyse der Elektronendichte und die daraus abgeleiteten Größen kaum abgehandelt. Außerdem wird, wie die Autoren bereits im Vorwort erwähnen, das aufstrebende Gebiet der „Plane-Wave“-Methoden und der DFT-basierten Ab-initio-Molekulardynamik-Simulationen (Car-Parrinello oder verwandte Methoden) in dem Buch nicht beschrieben. Angesichts des relativ geringen Umfangs des Buchs (294 Seiten)

scheint diese Auslassung unvermeidbar. Einige dieser hier nicht behandelten Themen wurden jedoch in den oben genannten Büchern und in *Atoms in Molecules, A Quantum Theory* von R. W. F. Bader (Clarendon Press, Oxford 1994) detailliert erörtert, und die anderen sollten in zukünftigen Ausgaben berücksichtigt werden. Solche aktualisierte Ausgaben sind zweifellos notwendig, um mit der rasanten Entwicklung auf diesem Gebiet Schritt zu halten.

Fazit: *A Chemist's Guide to Density Functional Theory* ist genau das was der Titel aussagt. Das Buch ist eine unschätzbare Quelle von Informationen und Wissen für Chemiker, die DFT-Methoden bereits anwenden oder anwenden wollen. Es kann auch als Lehrbuch für Teile einer Vorlesung in Theoretischer Chemie empfohlen werden. Allerdings wird der Preis Studierende eher vom Kauf abhalten. Deshalb wäre eine erschwinglichere Taschenbuchversion sehr wünschenswert.

Martin Kaupp

Institut für Anorganische Chemie  
der Universität Würzburg

**Practical Process Research & Development.** Von Neal G. Anderson. Academic Press, San Diego 2000. 354 S., geb. 89.95 \$.—ISBN 0-12-059475-7

Zum Thema „Process Research and Development“ in der Industrie wurden in letzter Zeit mehrere Bücher publiziert. Dieser Trend ist nicht zuletzt mit dem wachsenden Druck auf Pharma- und Chemiefirmen verknüpft, mehr Projekte in kürzerer Zeit zu entwickeln, um mehr innovative Produkte auf den Markt zu bringen. Deshalb ist es von großer Bedeutung, so schnell wie möglich die beste Herstellungsmethode für eine neue Verbindung zu finden. Andererseits werden sich aber die industriellen Verfahrensschemikern auch mehr und mehr bewusst, dass sie andere Kollegen aus der „Scientific Community“ an ihrem im Laufe der Jahre erworbenen Schatz an chemischer Erfahrung teilhaben lassen sollten. Dies war sicherlich einer der ausschlaggebenden Gründe für Neal G. Anderson, sein Buch

*Practical Process Research & Development* zu schreiben. Als sehr erfahrener Industriechemiker, der mehr als 20 Jahre in der chemischen Verfahrensforschung und -entwicklung in der pharmazeutischen Industrie tätig war, erklärt er im „Preface“, dass es sein Ziel war, mit diesem Buch eine umfassende, schrittweise und praxisnahe Einführung zum Thema organische Verfahrensforschung und -entwicklung für die Herstellung kleiner Moleküle zu geben.

Das Buch ist in 16 Kapitel unterteilt, in denen chemische und technologische Probleme diskutiert werden, die sowohl aus der eigenen Erfahrung des Autors als auch aus der Literatur stammen. Im ersten Kapitel, „Approaches to Process Development“, wird eine Einleitung in das Thema gegeben. Der Autor betont besonders die Bedeutung einfacher Scale-up-Operationen, da einfache Prozesse im Allgemeinen Zeit und damit auch Geld in den Versuchs- und Produktionsbetrieben einsparen. Weiterhin zeigt er, dass die Entwicklung erfolgreicher Verfahren nur durch ein Team von Spezialisten aus unterschiedlichen Disziplinen erreicht werden kann. Besonders nützlich für Anfänger ist die Beschreibung von Techniken, die ohne Probleme auch im großen Maßstab verwendet werden können, und solchen, bei denen dies nicht möglich ist. Ein weiterer wertvoller Bestandteil des gesamten Buches sind die vielen „TIPs“, die als markierte Hinweise die große Erfahrung des Autors weitergeben. Sie sind ebenso für den schnellen Leser sehr nützlich, da sie häufig die wichtigsten Punkte zu den einzelnen Themengebieten zusammenfassen. Der Informationsgehalt dieser „TIPs“ reicht von sehr wichtigen Ratschlägen, die selbst für erfahrene Verfahrensschemiker von Interesse sind, bis zu mehr oder weniger selbsterklärenden und allgemein bekannten Punkten. Die Mehrzahl dieser Hinweise ist jedoch ausgesprochen nützlich.

Im zweiten Kapitel werden verschiedene Aspekte der „Route Selection“ diskutiert. Im Allgemeinen ändert sich die Definition der besten Route im Verlauf der Entwicklung eines Verfahrens, da es am Anfang eines neuen Projekts durchaus akzeptabel sein kann, die Forschungsrouten in den Betriebsmaßstab zu übertragen, um für die nachfolgenden Entwicklungsfunktionen

eine schnelle Substanzversorgung zu gewährleisten. In späteren Entwicklungsphasen stehen andere Fragestellungen wie die technische Machbarkeit oder die Verfügbarkeit geeigneter Apparaturen in den Produktionsbetrieben sowie die langfristige Verfügbarkeit billiger Startmaterialien und Reagentien in großen Mengen mehr und mehr im Vordergrund. Das Ziel jeder Optimierung ist es, die preiswerteste Route zu einem neuen Wirkstoff zu finden, indem man z.B. die Zahl der Stufen und Schutzgruppenmanipulationen minimiert, die Vorteile einer konvergenten Synthese ausnutzt und schädliche Einflüsse auf die Umwelt vermeidet. Am Ende dieses Kapitels ist eine beispielhafte Tabelle zur Kostenschätzung angegeben, die nicht nur für die Beurteilung eines Syntheseweges, sondern auch für den Vergleich der Effizienz unterschiedlicher Routen verwendet werden kann.

Das folgende Kapitel „Reagent Selection“ betont die Bedeutung von Sicherheits-, Toxikologie- und Kostenbetrachtungen bei der Auswahl des richtigen Reagens für das Scale-up. Unter Berücksichtigung dieser Kriterien werden verschiedene Klassen von Reagentien diskutiert, z.B. metallorganische Basen und Alkoholate, Aminbasen, Oxidations- und Reduktionsmittel sowie Katalysatoren, polymergebundene Reagentien und Biokatalysatoren. Da bereits Generationen von Chemikern an Universitäten und in der Industrie Tausende von Reagentien für die Lösung synthetischer Probleme entwickelt haben, muss dieses Kapitel mit 27 Seiten unvollständig bleiben. Dennoch ist es eine gute Einführung und der Leser erhält wertvolle Hinweise. Interessante Literaturstellen werden zitiert, es fehlt jedoch ein Hinweis auf umfassendere Zusammenstellungen zum Thema Reagentien wie *Fieser und Fieser* oder *Encyclopedia of Reagents for Organic Synthesis* (Hrsg.: L. Paquette).

Aus unserer Sicht ist das Kapitel über „Solvent Selection“ eines der besten des ganzen Buches, da es in systematischer Weise beschreibt, wie ein Lösemittel ausgewählt werden sollte, um die Reaktionsgeschwindigkeit zu beschleunigen und die gewünschte Qualität und Ausbeute des Produkts sicherzustellen. Weiterhin ist es sehr wichtig, die Abfallmenge durch eine effiziente Wiederge-

winnung des Lösemittels zu verringern. Auch hier diskutiert der Autor Lösemittel, die für das Scale-up unbrauchbar sind, und solche, die im Betriebsmaßstab ohne Probleme verwendet werden können. Besonders wertvoll sind die Tabellen, in denen wichtige physikochemische Daten von Lösemitteln wie die Löslichkeit in Wasser oder die Fähigkeit, Azeotrope mit Wasser zu bilden, aus verschiedenen Quellen zusammengestellt sind. Er gibt auch Warnhinweise zur Handhabung von Lösemitteln im Betriebsmaßstab, da sie unter Umständen für Verunreinigungen in dem endgültigen Wirkstoff verantwortlich sein können, entweder indem sie direkt mit der Verbindung reagieren (z.B. die Alkylierung von Aminen durch Dichlormethan während der Lagerung von Lösungen über Nacht) oder durch hochsiedende Verunreinigungen des Lösemittels, die nach dem Abdestillieren des Lösemittels im Reaktionsprodukt verbleiben.

Das vierte Kapitel mit der Überschrift „Running the Reaction“ enthält viele wichtige Betrachtungen für die Übertragung einer Reaktion aus dem Labor in den Betriebsmaßstab. Unabhängig vom geplanten Maßstab der Reaktion muss zunächst mit höchster Priorität immer eine Sicherheitsbewertung der Reaktionsbedingungen erfolgen. In mehreren Abschnitten wird ausführlich diskutiert, dass der Erfolg bei der Maßstabsvergrößerung eines Verfahrens sowohl entscheidend von der Auswahl der geeigneten Reaktionsbedingungen (z.B. Temperatur, Druck, Reaktionszeit, Zugabereihenfolge der Reagentien, Durchmischung) als auch von der exakten Beschreibung der experimentellen Vorschrift abhängt. Die Phasentransferkatalyse wird als nützliche Technik für Reaktionen im großen Maßstab kurz erwähnt. Bedenkt man jedoch die Bedeutung dieser Methode, so wäre ein separates Kapitel zu diesem Thema wünschenswert gewesen.

Die „Effects of Water“ werden im Kapitel 6 erörtert, da Wasser eine entscheidende Rolle in einer Reaktion als Lösemittel, günstiges Hilfsreagens oder als Quelle von Nebenprodukten spielen kann. Obwohl der richtige Wassergehalt für viele Reaktionen sehr wichtig ist, stellt sich doch die Frage, ob dieses Kapitel nicht besser Teil des Kapitels 4

(„Solvent Selection“) sein sollte, da einige Aspekte bereits dort beschrieben sind.

„In-Process Controls“ (Kapitel 7) dienen dazu, zu beweisen, dass alle Verfahrensschritte wie erwartet vollendet wurden und sind daher für jede Verfahrensentwicklung unabdingbar. Diese IPCs sind auch deshalb sehr wichtig, da sie in den „Drug Master File“ (DMF) einer „New Drug Application“, die bei der Food and Drug Administration (FDA) eingereicht wird, hinzugefügt werden müssen. Diese regulatorischen Anforderungen werden in diesem und anderen Kapiteln kurz diskutiert. Da diese Fragestellungen jedoch für die tägliche Arbeit von Verfahrensschemikern in der pharmazeutischen Industrie immer wichtiger werden, wäre ein Kapitel zu diesem Themenbereich eine sehr gute Ergänzung für eine zweite Auflage dieses Buches.

Im Kapitel 8 gibt der Autor Ratschläge, wie eine Reaktion durch Minimierung der Nebenprodukte optimiert werden kann, da diese häufig die Aufreinigung erschweren und dadurch zu geringeren isolierten Ausbeuten führen können. Das Ergebnis einer Reaktion kann durch zahlreiche unterschiedliche Parameter wie Temperatur, Reagentien, Lösemittel, Konzentrationen, Durchmischung und Reaktionszeiten beeinflusst werden. Die erfolgreiche Optimierung von Reaktionen durch entsprechende Anpassung dieser Parameter wird anhand von Literaturbeispielen für Synthesen im Großmaßstab erläutert. Leider sind viele Prozesse jedoch sehr komplex, sodass der klassische Weg, nur jeweils eine Variable anzupassen, fehlschlagen kann. Eine strukturierte Vorgehensweise bei voneinander abhängigen Parametern ist daher, die Methoden der statistischen Versuchsplanung anzuwenden. Die Einführung in dieses wirkungsvolle Optimierungswerkzeug am Ende des Kapitels ist leider zu kurz; die theoretischen Grundlagen und mehr Anwendungsbeispiele statistischer Versuchsplanung hätten gründlicher behandelt werden sollen. Besonders die Kombination von statistischer Versuchsplanung mit Syntheserobotern und automatisierten Systemen zur Prozessoptimierung ist ein neues und sehr effizientes Werkzeug. Dieses derzeit extrem schnell wachsende Gebiet der

Automation in der chemischen Verfahrensforschung und -entwicklung wird nur sehr kurz am Ende des Kapitels erwähnt (2 Sätze!), und die Literaturzitate sind sehr lückenhaft. Hinweise auf neue Entwicklungen wie die Verwendung von Mikroreaktoren in der chemischen Entwicklung und Produktion fehlen völlig. Dieser letzte Abschnitt macht den Eindruck, als ob er vom Autor in ziemlicher Eile hinzugefügt wurde und sollte in einer zweiten Auflage deutlich ausführlicher sein.

Bedenkt man die Vielzahl katalytischer Reaktionen, die dem Organiker zur Verfügung stehen, so muss die kurze Abhandlung über die Optimierung katalytischer Reaktionen unvollständig bleiben (Kapitel 9). Trotzdem ist dieses Kapitel wertvoll, da der Autor viele Tipps für die generelle Herangehensweise an katalytische Optimierungsprobleme an den Leser weitergibt. Auch hier gilt, dass die schnelle Bestimmung des besten Parametersatzes durch ein automatisiertes Screening der Reaktionsbedingungen in Zukunft die Entwicklung und Optimierung katalytischer Reaktionen drastisch beschleunigen wird und deshalb ausführlich diskutiert werden sollte.

Das Kapitel „Work-up“ ist eines der bemerkenswertesten des ganzen Buches, da eine derartige Zusammenfassung über dieses Thema aus anderen Quellen nicht so leicht zugänglich ist, und das Thema gewöhnlich auch nicht im besonderen Fokus der Lehre an den Universitäten steht. Der Auftrag eines Verfahrensschemikers ist keineswegs erfüllt, wenn die Reaktion erfolgreich verlaufen ist, sondern die Aufarbeitung der Reaktionsmischung und die Isolierung des Produkts in reiner Form ist mindestens genauso wichtig. Berücksichtigt man diese Bedeutung, dann wäre es wünschenswert, noch mehr aus der reichen Erfahrung des Autors auf mehr als 18 Seiten zu lernen. Besonders der Abschnitt über festphasengebundene Reagentien ist zu kurz geraten, da diese

Reagentien bereits eine wichtige Rolle in umweltfreundlichen Prozessen spielen.

In Kapitel 11 wird über die „Tools for Purifying the Product“ berichtet. Die Reinigung durch klassische Säulenchromatographie und „Simulated Moving Bed“-Chromatographie wird ebenso vorgestellt wie die Kristallisation und Ausrührung. Für den Verfahrensschemiker in der pharmazeutischen Industrie ist die reproduzierbare Herstellung einer bestimmten polymorphen Kristallform und die Auswahl des am besten geeigneten Salzes besonders wichtig. Die Bedeutung der Auswahl und Herstellung der besten polymorphen Form wird auch im folgenden Kapitel über „Final Product Form and Impurities Consideration“ zusammen mit anderen regulatorischen Aspekten wie der Qualität des chemischen Wirkstoffes diskutiert.

Kapitel 13 („Vessels and Mixing“) ist eher technisch orientiert. Der starke Einfluss, den die Durchmischung und das Reaktordesign auf die Maßstabsvergrößerung einer Reaktion haben können, wird erläutert, und die Eigenschaften der Batch- und der kontinuierlichen Fahrweise werden verglichen. Einige Spezialreaktoren wie photochemische und elektrochemische Reaktoren werden kurz vorgestellt. Neben diesen interessanten technischen Aspekten erscheint der Absatz über immobilisierte Katalysatoren an dieser Stelle deplatziert und sollte besser in das Kapitel 9 verschoben werden.

„Preparing for and Implementing the Scale-up Run“ ist das Thema des Kapitels 14. Der Autor zeigt hier schrittweise auf, wie eine Reaktion erfolgreich vom Labor- in den Betriebsmaßstab übertragen werden kann, und welche potentiellen Probleme dabei berücksichtigt werden müssen. Eine nützliche Ergänzung am Ende des Kapitels ist die Checkliste zur Vorbereitung des Scale-ups.

Manchmal treten, nachdem ein Verfahren in den Betrieb übergeben wurde, neue Probleme während der weiteren

Entwicklung und Produktion auf. Diese Probleme müssen sehr schnell gelöst werden, da im Allgemeinen aufgrund des finanziellen Einflusses solcher Schwierigkeiten ein erhöhter Druck besteht. Deshalb ist „Troubleshooting“ (Kapitel 15) ein sehr wichtiger Aspekt der täglichen Arbeit eines Verfahrensschemikers. Die schrittweise Analyse und Lösung der Probleme werden in sehr gründlicher Weise beschrieben.

Das letzte Kapitel über „Chiral Syntheses“ (14 Seiten) ist ziemlich lückenhaft und nicht immer konsistent: So ist die chemische Racematspaltung (Abschnitt II.B.2) kein Beispiel für Moleküle, die durch asymmetrische Synthese (Überschrift Abschnitt II) hergestellt werden. Dieses Kapitel an das Ende des Buches zu setzen erscheint wenig logisch, da es besser zu den eher chemisch orientierten Abschnitten über die Reaktionsoptimierung oder die katalytischen Reaktionen passen würde.

Das Layout des Buches ist von guter Qualität, und es ist daher auch leicht lesbar. Wie oben erwähnt sind die vielen Tipps und Tabellen sehr wertvoll für die praktische Arbeit. Dies wird ergänzt durch über 550 Literaturzitate, die bis Anfang 1999 publizierte Arbeiten berücksichtigen.

Zusammenfassend sind wir der Meinung, dass jeder Neuling in dem spannenden Feld der Verfahrensforschung und -entwicklung dieses Buch lesen sollte. Erfahrene Verfahrensschemiker und Universitätskollegen werden es ebenfalls sehr nützlich und anregend finden. Da die Sprache der Aktienanalysten und Broker inzwischen sehr populär ist, empfehlen wir *Practical Process Research & Development* von Neal G. Anderson als „unbedingt kaufen“, da diese Investition sich sehr schnell auszahlen wird.

Hilmar Weinmann, Ulf Tilstam  
Schering AG, Berlin