

sammenstellung von aktuellen Marktdata, Umsatzzahlen in den verschiedenen Bereichen, Preisen für Membranen und Membran-Module und deren Entwicklung in den letzten Jahren. Damit ist beispielsweise der Hochschullehrer, der für seine Vorlesung Daten sucht, mit denen sich die wachsende Bedeutung der membranbasierten Trennverfahren untermauern oder die breite Anwendbarkeit in verschiedenen Bereichen demonstrieren lässt, nicht mehr auf das eher zufallsgesteuerte Sammeln von Informationen aus Publikationen der Membranhersteller oder aus Tagungsbeiträgen angewiesen. Wer auf dem Gebiet der Membranverfahren arbeitet, findet vielleicht Anregungen zur Ausweitung seiner Aktivitäten auf andere, verwandte Anwendungen. In diesem Sinn ist das Buch sicher empfehlenswert.

Gerhard Maier
polyMaterials AG, Kaufbeuren

Colour Chemistry. Von R. M. Christie. Royal Society of Chemistry, Cambridge 2001. XII + 206 S., Broschur 19.95 £.—ISBN 0-85404-573-0

Die Farbenchemie gehört inzwischen zu den reifen Arbeitsgebieten. Dies wird nicht nur durch Umstrukturierungsprozesse in der Industrie und Produktionsverlagerungen nach Asien deutlich, sondern auch durch einen stetigen Rückgang der wissenschaftlichen Publikationen auf diesem Sektor. Die letzten großen Monographien, die sich dieser Thematik widmen, sind schon vor ca. 10 Jahren erschienen. Ist inzwischen soviel Neues passiert, dass sich eine weitere zusammenfassende Darstellung lohnt?

R. M. Christie versucht in didaktisch geschickter Weise auf ca. 200 Seiten einen Überblick über Farbstoffe und Pigmente zu geben und wendet sich in erster Linie an Studierende und Leser, die sich in dieses Gebiet einarbeiten wollen. Nach einer Einführung in die Historie und einer Schilderung der physikalisch-chemischen Grundlagen der Farbenchemie, erfolgt die Besprechung der wichtigsten Farbstoff- und Pigmentstrukturen sowie deren Synthese. Hierbei werden auch Chromophore berück-

sichtigt, die relativ neu sind, d.h. erst in den 80er Jahren eingeführt wurden.

In den drei folgenden Kapiteln werden die physikalisch-chemischen Prozesse, die für die Anwendung von Bedeutung sind, behandelt. Besonderes Gewicht wird auf die Textilfärbung und die Verarbeitung von Pigmenten gelegt; Papier- und Lederfärbung werden nur gestreift. Bedauerlich ist, dass, vermutlich aus Platzgründen, thermodynamische und kinetische Aspekte des Färbeprozesses kaum diskutiert werden. Detaillierter beschreibt Christie hingegen die Anwendung der sogenannten „funktionalen Farbstoffe“, die in Hightechbereichen eingesetzt werden und angesichts der Reife des übrigen Farbengebiets besonderes Interesse beanspruchen. Die aufgeführten Beispiele sind zwar nicht immer die aktuellsten, aber sie werden didaktisch geschickt präsentiert, ausführlich erläutert und zeigen die Breite der Möglichkeiten auf.

Im letzten Kapitel stehen umweltrelevante und toxikologische Aspekte im Mittelpunkt. In kurzer, sehr gedrängter Form erfährt der Leser etwas über die Abwasserproblematik bei der Herstellung und Anwendung von Farbstoffen, wird über mögliche Konzepte zur Abwasserentfärbung informiert und lernt schließlich Besonderheiten der deutschen Bedarfsgegenständeverordnung kennen. Auch dieses Kapitel ist zu kurz geraten, es fehlt z.B. eine Liste der inkriminierten aromatischen Amine.

In diesem Buch werden fast alle modernen Aspekte der Farbenchemie angesprochen. Allerdings kann aus Platzmangel vieles nur in qualitativer Form und damit etwas oberflächlich dargestellt werden. Durch das Weglassen von farbigen Abbildungen und Illustrationen wird die Lesbarkeit nicht gerade erleichtert. Positiv zu sehen sind die vielen mechanistischen Vorschläge für industriell bedeutende Farbstoffsynthesen. Das Buch könnte wesentlich an Wert gewinnen und damit wirklich einen Einstieg in die Farbenchemie bieten, wenn Hinweise auf aktuelle Literatur oder Übersichtsartikel gegeben würden. Die Aufzählung von Lehrbüchern ohne Textverweise am Schluss des Buches reicht hier nicht aus.

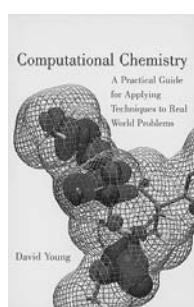
Insgesamt gesehen ist das Buch von Christie eher ein Lehrbuch als eine Monographie und kann daher in erster

Linie Studierenden empfohlen werden, die an der Farbenchemie interessiert sind.

Günther Seybold
BASF AG, Ludwigshafen

Computational Chemistry. A Practical Guide for Applying Techniques to Real World Problems. Von David Young. Wiley-Interscience, New York 2001. 381 S., geb. 50.50 £.—ISBN 0-471-33368-9

Das vorliegende Werk von David Young ist weniger ein einführendes Lehrbuch als vielmehr ein Handbuch in Form eines Lehrbuchs, das eine enorme



Vielfalt an Methoden und Anwendungen in der Theoretischen Chemie kurz und knapp behandelt. Es richtet sich an experimentell tätige Chemiker, die sich Problemen gegenübersehen, die am besten mit computerunterstützten Rechenmethoden angegangen werden. Dieses Buch ist ein idealer Ausgangspunkt, um solche Probleme zu lösen.

Computational Chemistry ist in drei Teile gegliedert: Teil I: „Basic Topics“, Teil II: „Advanced Topics“ und Teil III: „Applications“. Teil I folgt einer allgemeinen Einleitung und beginnt mit Kapitel 2, das einen kurzen Abriss der grundlegendsten physikalischen Konzepte und Theorien wie Thermodynamik, Quantenmechanik (QM) mit Schrödinger-Gleichung und statistische Mechanik bietet. Im folgenden Kapitel werden die meisten, wenn nicht alle, modernen Rechenmethoden von der Molekülmekanik (MM) über semiempirische Methoden bis hin zu Ab-initio-Methoden und Dichtefunktionaltheorie (DFT) vorgestellt. Außerdem werden die Moleküldynamik (MD), Monte-Carlo-Simulationen und Populationsanalysen behandelt und Berechnungen verschiedener Moleküleigenschaften (z.B. NMR-Parameter, Siedepunkt und biologische Aktivität) erläutert. Auch spezielle technische Themen wie die Z-Ma-

trix-Konstruktion für die Geometrieeoptimierung, Basissätze in Ab-initio- und DFT-Rechnungen und der effiziente Einsatz von Computerressourcen werden erläutert. Kapitel 16, das allgemeine Hinweise gibt, wie man computerunterstützte Rechnungen durchführt, schließt den ersten Teil ab.

Die ersten fünf Kapitel von Teil II beschäftigen sich mit Potentialflächen und Konformationen, wobei Berechnungen von Übergangszuständen und Reaktionsgeschwindigkeiten diskutiert werden. Weitere Kapitel befassen sich mit QM/MM-Verfahren, Lösungsmittelleffekten und angeregten elektronischen Zuständen. Auch über QSAR(quantitative structure-activity relationships)-Rechnungen sowie Berechnungen von chemischen Verschiebungen oder nicht-linearen optischen Eigenschaften (z.B. Polarisierbarkeiten und Hyperpolarisierbarkeiten) wird berichtet. Hinsichtlich technischer Themen bietet der zwei-

te Teil Anregungen zur Lösung von SCF-Konvergenzproblemen sowie Diskussionen über Größenkonsistenz quantenmechanischer Methoden, Spin-Kontaminierung und Anpassung von Basisätzen und Kraftfeldern. In den letzten Kapiteln von Teil II werden relativistische Effekte, Bandstrukturen von Kristallen, mesoskopische Simulationen beispielsweise von Lösungen oder Kristallisationsprozessen und Voraussagen von Synthesewegen behandelt.

Das Ganze wird in Teil III mit Beiträgen über Anwendungen verschiedener Methoden in der Organischen, Anorganischen und Biochemie, in Simulationen von Flüssigkeiten und Polymeren, in der Festkörperchemie sowie in der Oberflächenchemie ausgezeichnet abgerundet.

Wie bereits erwähnt ist *Computational Chemistry* kein Lehrbuch, denn die aufgeführten Themen sind einfach zu zahlreich, um in allen Einzelheiten darge-

stellt werden zu können. Dies ist nicht das Ziel dieses Buchs. Es ist eher ein Nachschlagewerk: Ein ausgezeichnetes Sachwortverzeichnis führt den Leser rasch zu dem Kapitel, in dem der entsprechende Begriff klar und didaktisch gut erklärt wird. Wer sich intensiver mit einem Thema beschäftigen will, wird auf weiterführende Literatur, hauptsächlich Übersichtsartikel und Lehrbücher, verwiesen.

Alles in allem hat Young ein sehr nützliches Buch verfasst, das fortgeschrittenen Studierenden, (Post-)Doktoranden und sicherlich auch praktisch arbeitenden Forschern für die Durchführung von Rechnungen in fast allen Bereichen der Chemie empfohlen werden kann.

F. Matthias Bickelhaupt

Theoretische Chemie
Scheikundig Laboratorium
der Vrije Universiteit
Amsterdam (Niederlande)