

sammenstellung von aktuellen Marktdaten, 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 „funktionellen 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 Bedarfsgegenstandsverordnung 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 Auflistung 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 computerunter-

stützten 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 Molekülmechanik (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-

