

weise wird „Adogen“ und „Aliquat“ geschrieben, wenn „Adogen 464“ und „Aliquat 336“ gemeint ist, oder im Zusammenhang mit verschiedenen Salzen von China-Alkaloiden der Ausdruck „quininium salt“ gebraucht. Abgesehen von diesen Kleinigkeiten ist das Layout, der Druck und die Fertigung dieses Buchs erstklassig.

Unweigerlich wird jede Monographie zu diesem Themenbereich mit den Klassikern *Phase Transfer Catalysis* (Hrsg.: E. V. Dehmlow, S. S. Dehmlow; VCH, Weinheim, 1993) und *Phase-Transfer Catalysis – Fundamentals, Applications, and Industrial Perspectives* (C. M. Stark, C. L. Liotta, M. C. Halpern; Chapman & Hall, New York, 1994) verglichen werden. Im Unterschied zu diesen Werken werden in dem vorliegenden Buch ausschließlich quartäre Ammoniumsalze beschrieben, andere Typen von Phasentransferkatalysatoren wie Phosphoniumsalze oder Kronenether werden nicht behandelt. Außerdem fehlt die in den oben genannten Büchern aufgenommene detaillierte Diskussion der Kinetik und der Reaktionsmechanismen. Die Beschreibung neuer Entwicklungen und die schwerpunktmäßige Darstellung praktischer Aspekte machen den Wert dieses Buches aus. Es ist ein ideales Nachschlagewerk für jeden, der sich über die phasentransferkatalytischen Eigenschaften eines bestimmten quartären Ammoniumsalzes informieren will. Für Wissenschaftler in der organischen Synthesechemie ist es eine ausgezeichnete Quelle für Anregungen.

Barry Lygo

School of Chemistry
University of Nottingham
(Großbritannien)

Quantum-Mechanical Prediction of Thermochemical Data. Herausgegeben von Jerzy Cioslowski. Kluwer academic publishers, Dordrecht 2001. 251 S., geb. 90.00 \$.—ISBN 0-7923-7077-5

Das von Jerzy Cioslowski herausgegebene Buch bietet einen exzellenten Überblick über moderne theoretische Verfahren zur Vorhersage thermochemischer Eigenschaften. Dieses anspre-

chend gestaltete Werk ist für Wissenschaftler der theoretischen Chemie sicherlich sehr nützlich. Die behandelten Ansätze reichen von strikten Ab-initio-Verfahren über leistungsfähige parametrisierte Schemata bis hin zu semiempirischen Methoden.

In Kapitel 1 befassen sich Helgaker et al. mit Ab-initio-Studien einfacher Moleküle auf höchsten theoretischen Niveaus. Wie ausführlich dargelegt und diskutiert wird, sind die Ergebnisse von bemerkenswerter Qualität und vielfach innerhalb experimenteller Fehlerrgrenzen. Unumwunden wird eingeräumt, dass derartige Methoden auf relativ kleine Verbindungen der ersten Achterperiode begrenzt sind. In Kapitel 2 stellen Martin und Parthiban die Weizmann-Theorien W1 und W2 sowie deren Varianten vor, wobei der Leser von der Entwicklung der Verfahren bis zu den Anwendungen geführt wird und somit den damit verbundenen Aufwand kennen lernt. In bemerkenswerter Weise gelingt es den Autoren die Balance zwischen sachgerechten theoretischen Formalismen und einer anschaulichen Darstellung zu halten. Im nächsten Kapitel beschreiben Raghavachari und Curtiss die Gaussian-Theorien (Gn), wobei der Schwerpunkt auf dem G3-Verfahren liegt, das thermodynamische Eigenschaften mit „chemischer Genauigkeit“ liefert. Etwas abträglich ist, dass sie sich auf die Präsentation der Erfolge der Gn-Methoden beschränken, ohne deren Grenzen zu diskutieren oder auf die ähnlich leistungsfähigen Wn- und CBS-Verfahren einzugehen. In Kapitel 4 stellt Petersson das „complete basis set“ (CBS)-Schema vor, das sowohl vom Ansatz her als auch in Bezug auf die Qualität der Ergebnisse mit den Wn- und Gn-Theorien konkurrieren kann, wobei CBS-Varianten auch die Behandlung deutlich größerer Systeme erlauben. Ein Anwendungsbeispiel aus der Enzymchemie lässt den Autor schließlich folgern: „This is an exciting time for computational science.“

Mit Kapitel 5 werden die „chemisch genauen“ Methoden in Richtung Näherungsverfahren verlassen. Die von Ferreira et al. beschriebene „electron propagator“-Näherung bietet einen rechen-technisch effektiven Formalismus für die Beschreibung thermodynamischer Eigenschaften, doch treten deutliche Ab-

weichungen zwischen Experiment und Theorie auf, und eine systematische Verbesserung ohne wesentliche Erhöhung des Rechenaufwands erscheint schwierig. Ein Vorteil dieser Methode liegt in der vergleichsweise genauen Berechnung von Ionisierungsenergien und angeregten Zuständen größerer Moleküle. In Kapitel 6 liefern Henry und Radom mit der Beschreibung der Thermochemie substituierter Alkyradikale ein Paradebeispiel angewandter Quantenchemie. Dabei wurden mit Gn-RAD Varianten der entsprechenden Gn-Verfahren entwickelt, die besonders auf die Beschreibung offensichtlicher Systeme abgestimmt sind. Die angebotene Datenfülle erlaubt ferner den Vergleich der Verfahren in Bezug auf relative und absolute Energien sowie Aktivierungsparameter und ist auch interessierten Experimentatoren zu empfehlen. In Kapitel 7 wenden sich Fröhlich und Frenking der Übergangsmetallchemie zu. Die Autoren beschränken sich bewusst auf eigene Arbeiten und liefern eine Fülle von Daten bei einem allerdings begrenzten Gewinn an allgemeiner Erkenntnis. Zudem sind die meisten der vorgestellten Systeme ganz oder nahezu koordinativ abgesättigt, so dass die auch heute noch teilweise sehr gravierenden Probleme bei der Behandlung von Übergangsmetallverbündungen nicht deutlich werden. In Anbetracht der Bedeutung der Übergangsmetallchemie und der gleichzeitigen Herausforderung für die Theorie hätte das Buch sicherlich von einem zweiten Kapitel zu diesem Thema profitieren können. Zum Abschluss wird von Thiel in Kapitel 8 der gegenwärtige Stand semiempirischer Verfahren aufgezeigt. Auch wenn diese Methoden in den letzten Jahren durch die rasche Entwicklung der Ab-initio-Methoden (und der Rechenleistung) in den Hintergrund gedrängt wurden, stellen sie immer noch das Arbeitspferd theoretischer Anwendungen in der Wirkstoffforschung dar. Thiel zeigt ferner, dass Orthogonalisierungsverfahren die Leistungsfähigkeit von MNDO-Methoden zur Vorhersage thermochemischer Eigenschaften noch deutlich verbessern können.

Zusammenfassend ist festzustellen, dass alle Kapitel den gegenwärtigen Stand der jeweils behandelten theoretischen Methoden darstellen, wobei die

Beiträge von ausgewogenem Umfang sind und ausreichend Literaturhinweise liefern. Zwei Schönheitsfehler bleiben zu vermerken: Die Dichtefunktionaltheorie wird zwar mehrfach gestreift, doch nicht im Detail diskutiert, obwohl DFT und Hybridverfahren zu den heutzutage populärsten theoretischen Methoden zählen. Aus meiner Sicht wäre ein separates Kapitel über DFT angebracht gewesen. Vor allem aber fehlt dem Buch eine übergeordnete Bewertung der verschiedenen Verfahren. Tatsächlich lässt der im Inhaltsverzeichnis angegebene Titel „Theoretical Thermochemistry: A brief survey“ gerade eine solche Übersicht erwarten, doch ist die Enttäuschung dann um so größer, wenn sich herausstellt, dass der korrekte Titel von Kapitel 8 „Semiempirical Thermochemistry: A brief survey“ lautet.

Das Buch kann vor allem Wissenschaftlern empfohlen werden, die sich an Hochschulen und in der Industrie mit angewandter Quantenchemie befassen. Doch auch Neueinsteigern wird eine gute Übersicht des Repertoires moderner theoretischer Verfahren zur Vorher sage thermochemischer Eigenschaften geboten.

Detlef Schröder

Institut für Chemie
der Technischen Universität Berlin

Molecularly Imprinted Polymers. Man-Made Mimics of Antibodies and their Applications in Analytical Chemistry. (Techniques and Instrumentation in Analytical Chemistry – Vol. 23). Herausgegeben von *Börje Sellergren*. Elsevier, Amsterdam 2000. 557 S., geb. 301.00 \$.—ISBN 0-444-82837-0

„Intelligente Polymere“, „Polymere mit Gedächtnis“ und „künstliche Antikörper“: mit diesen Schlagwörtern werden geprägte Polymere (Molecularly Imprinted Polymers, „MIPs“) oft beschrieben. Es handelt sich hier um anorganische oder organische Materialien, die durch vernetzende Polymerisation in Gegenwart von Templayen (kleine Moleküle, Biopolymere, Mikroorganismen oder Kristalle) hergestellt werden. Durch Entfernen der Template entstehen spezifische, zum Templat kom

plementäre Abdrücke. Die Anfänge dieser Technik liegen bereits 80 Jahre zurück, aber erst in den letzten Jahren kam es zu einer breiten Akzeptanz dieser Methode verbunden mit einer fast exponentiell ansteigenden Publikationsrate.

Das von B. Sellergren herausgegebene Buch ist in 21 Kapitel gegliedert, die in vielen Fällen von den jeweils führenden Spezialisten auf dem Gebiet verfasst wurden. Es beginnt mit einem sehr interessanten historischen Überblick, gefolgt von einer Zusammenfassung der physikalisch-chemischen Grundlagen des molekularen Prägens. In den nächsten zehn Kapiteln werden die unterschiedlichen Methoden zur Herstellung von MIPs sowie spezielle Polymerisationstechniken ausführlich erörtert. Von den verbleibenden acht Kapiteln, in denen Anwendungen von MIPs in der Analytischen Chemie, z.B. bei chromatographischen Untersuchungen, beschrieben werden, sind allein vier dem sich rapide entwickelnden Gebiet der MIP-basierten Chemosensoren gewidmet.

Dem Anspruch des Herausgebers – „this book provides the first complete coverage of the area of molecular imprinting“ – wird das Buch nahezu gerecht. Die im Titel angedeutete Fokussierung auf Analytische Chemie beinhaltet jedoch eine gewisse Einschränkung. Anwendungen in der organischen Synthese und in der Katalyse hätten aufgrund der zahlreichen Publikationen zu diesem Thema sicherlich ein eigenes Kapitel verdient. Für Leser, die auf dem Gebiet des molekularen Prägens arbeiten oder arbeiten wollen, sind die vielen technischen Details und die Fülle von Literaturzitaten (über 1400!) von besonderem Interesse. Leser, die nur einen ersten Überblick über diese Technik gewinnen wollen, sollten eher auf kürzere Übersichtsartikel zurückgreifen (z.B.: G. Wulff, *Angew. Chem. 1985, 107*, 1958; *Angew. Chem. Int. Ed. Engl. 1995, 34*, 1812).

In einer Sammlung von Beiträgen vieler, internationaler Autoren sind inhaltliche Überschneidungen nur schwer zu vermeiden. Dieser Mangel tritt leider auch im vorliegenden Buch auf, denn viele Ergebnisse werden mehrfach vorgestellt. Zudem sind die Einleitungen in einigen Kapiteln unnötig ausführlich

und redundant. Auf Seite 396 wird beispielsweise noch einmal anhand von Graphiken der Unterschied zwischen kovalentem und nicht-kovalentem Prägen erklärt, obwohl vorher zwei Kapitel mit insgesamt über 100 Seiten dieses Thema ausführlich behandelt haben. Ärgerlich ist, wenn in zwei Kapiteln mit zum Teil den gleichen Autoren ganze Textpassagen nahezu identisch sind (Seite 196 und Seite 286; Seite 197 und Seite 290). Wie bei der Erstauflage eines fast 600 Seiten umfassenden Buches zu erwarten war, sind auch einige kleinere Fehler zu bemängeln, z.B. das Dublikat zweier Graphiken auf Seite 299 und 300 und die mehr als ungeschickte Abkürzung „Me“ für Metall auf Seite 199.

Insgesamt gesehen ist dieses Buch jedem zu empfehlen, der eine aktuelle und detaillierte Zusammenfassung der faszinierenden Technik des molekularen Prägens sucht.

Kay Severin

Institut de Chimie
Minérale et Analytique
École Polytechnique Fédérale
de Lausanne (Schweiz)

Chemiluminescence at the Turn of the Millennium. Herausgegeben von *Steffen Albrecht, Thomas Zimmermann und Herbert Brandl*. Schweda-Werbedruck GmbH, Druckerei & Verlag, Dresden 2001. 368 S., Broschur 150.00 \$.—ISBN 3-980-7853-0-0

Als Teilnehmer zahlreicher Konferenzen stellen wir oft fest, dass es vielen Postervorträgen an Qualität mangelt. Die in das vorliegende Buch aufgenommenen Beiträge, dazu gehören auch Postervorträge, sind jedoch sorgfältig ausgewählt und alle qualitativ hoch stehend.

Das Buch ist in 6 Teile gegliedert. Der 1. Teil, „Chemiluminescence – basics, reaction types, demonstrations“ umfasst 15 Beiträge. In vier davon bieten Adam et. al. und Baader et. al. neue Einblicke in die noch unklaren Mechanismen von Dioxetan-Reaktionen und der Peroxyoxalat-Reaktion: Ein kurzer Übersichtsartikel beschäftigt sich mit der Chemolumineszenz (CL) von Luminol und