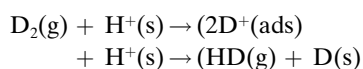
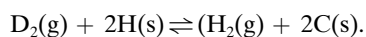


Das Buch ist in elf Kapitel gegliedert. In Kapitel 1 wird ein kurzer Überblick über die geschichtliche Entwicklung der Forschung an Oxometallaten gegeben. Kapitel 2 ist der Synthese dieser Verbindungen gewidmet, bietet aber keine detaillierten Informationen. Die physikalische Charakterisierung von Oxometallaten steht in Kapitel 3 im Mittelpunkt des Interesses, wobei die Verwendung diverser Methoden an Beispielen dargestellt wird. Es fällt auf, dass so wichtige Methoden wie Raman-Spektroskopie und ICP („inductively coupled plasma“) unerwähnt bleiben. Während in Kapitel 4 Struktur und Volumeneigenschaften von Oxometallaten abgehandelt werden, beschäftigt sich das umfangreichere Kapitel 5 mit deren thermischer und pH-Stabilität. Oxometallate werden in der Katalyse oft in getragener Form eingesetzt. Mit der Synthese, Charakterisierung und den Eigenschaften von solchen Systemen unter Verwendung eines breiten Spektrums von Trägermaterialien befasst sich Kapitel 6. Mikroporosität, Sorption und Diffusion in Metall-Sauerstoffclustern und der Kationenaustausch der Gegenionen sind das Thema von Kapitel 7. Dabei wird insbesondere der Ursprung der Mikroporosität und deren Abhängigkeit von der Natur des Gegenions diskutiert. Oxometallate haben Säure- und Redoxeneigenschaften. Kapitel 8 beschreibt die Charakterisierung von Säureeigenschaften mit physikalischen Methoden und mithilfe von Testreaktionen. Ein kurzer Abschnitt dieses Kapitels befasst sich mit den Redoxeneigenschaften. Die vergleichsweise umfangreichen Kapitel 9 und 10 sind säurekatalytischen Prozessen und Oxidationsreaktionen an Oxometallaten gewidmet. In Kapitel 9 über die Säurekatalyse werden die Umwandlung von Methanol in Kohlenwasserstoffe (MTG), Reaktionen von Alkoholen, die Umwandlung von Alkanen und Alkenen, Alkylierungen und Friedel-Crafts-Reaktionen sowie Ringerweiterungen und Ringkontraktionen vorgestellt. Die in Kapitel 10 behandelten Oxidationsreaktionen umfassen Oxidationsprozesse von Alkanen, Alkenen, Methacrolein und Isobuttersäure. Das Buch schließt mit einer kurzen Abhandlung über die Verwendung von Oxometallaten in umweltrelevanten Prozessen in Kapitel 11.

*Metal Oxygen Clusters* gibt einen breiten Überblick über die bis einschließlich 1999 und Anfang 2000 erschienene Literatur über Oxometallate. Der Leser einer Monographie zu einem thematisch eingeschränkten Thema erwartet ohne Zweifel eine kritische Stellungnahme des Autors zu den dargestellten Literaturarbeiten. Dies ist leider in dem Buch nicht oder nur in äußerst begrenztem Umfang der Fall. Auch fehlt bei allen Kapiteln eine abschließende Zusammenfassung oder Schlussfolgerung. An mehreren Stellen wird der Verweis auf andere Abschnitte des Buchs („noted elsewhere“) gegeben, ohne dass Seitenzahl und/oder Abschnittsnummer angegeben werden. Es gibt eine Reihe von unnötigen Wiederholungen in Text und Abbildungen. So sind die Abbildungen 5.4, 5.5 und 5.6 identisch mit den Abbildungen 3.1, 3.2 und 3.3. Außerdem werden SI-Einheiten nicht konsequent verwendet. Energien werden meist in kcal/mol und nur gelegentlich in der zu bevorzugenden Einheit kJ/mol angegeben. Temperaturen werden in Abbildungen und Text in °C, K und °K(!) angegeben, wobei letztere Einheit selbstverständlich inkorrekt ist. Als Entropieeinheit wird kcal/mol statt der richtigen Einheit kJ/molK verwendet. Eine Reihe von weiteren Nachlässigkeiten sind zu nennen. So ist z. B. in Abschnitt 6.1.2 zu lesen „... TiO<sub>2</sub> in the form of titania ...“ oder die katalytischen Aktivitäten von verschiedenen Katalysatoren werden verglichen ohne anzugeben, welche Größen dazu herangezogen wurden und wie die katalytische Aktivität normiert wurde. Die Ladungsbilanzen in stöchiometrischen Gleichungen auf Seite 170 ( $\text{H}_2(\text{g}) \rightarrow 2\text{H}^+(\text{ads})$ ) und Seite 171.



sind nicht korrekt. Leider ist das Buch auch nicht frei von Druckfehlern, von denen nur einer angeführt sei:



Die Qualität der Abbildungen entspricht nicht dem heutigen Standard: Sie sind nicht einheitlich beschriftet (Groß- und Kleinschreibung), und gelegentlich werden unterschiedliche Symbole für die

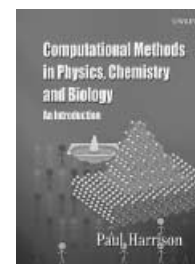
gleiche Größe verwendet, z. B. für den Porenradius in den Abbildungen 7.5 bis 7.8. Das Inhaltsverzeichnis ist völlig unzureichend.

Trotz dieser Schwächen kann das Buch auf dem Gebiet der Oxometallate Tätigen als wertvolle Literaturquelle empfohlen werden. Für Neueinsteiger ist es weniger geeignet.

Helmut Knözinger  
Department Chemie/  
Physikalische Chemie  
der Universität München

**Computational Methods in Physics, Chemistry and Biology.** Von *Paul Harrison*. John Wiley & Sons, Inc., New York 2001. 201 S., Broschur 25.95 £.—ISBN 0-471-49563-8

Die Berechnung von physikalischen Phänomenen mithilfe von Computermodellierung hat sich bei der Untersuchung der uns umgebenden Natur neben dem Experiment und der Theorie als dritte Säule etabliert. Das vorliegende Buch will Studie-



renden der Physik, Chemie, Biologie und verwandten Disziplinen die grundlegenden Techniken dieser in vielen Berechnungen angewandten computer-gestützten Verfahren vermitteln. In neun Kapiteln werden z. B. numerische und Näherungslösungen der Schrödingergleichung wie Störungstheoriemethoden und das Variationsprinzip, technische Implementierungen wie Matrixmethoden und die Verwendung von Basis-sätzen zur Beschreibung von Zustandsfunktionen, deterministische und stochastische Simulationstechniken, die Perkolationstheorie, evolutionäre Methoden und genetische Algorithmen sowie die Moleküldynamik behandelt.

Die physikalischen Konzepte, die die verschiedenen Rechenverfahren zu modellieren versuchen, werden sehr knapp und oft oberflächlich vorgestellt. Konstrukte wie das Kronecker- $\delta$  oder Divergenz werden ohne zusätzliche Erklärungen verwendet. Ohne solide Vorkennt-

nisse wird der Leser zweifellos Schwierigkeiten haben, diese wichtigen Hintergrundinformationen zu verstehen. Die Rechenverfahren werden dagegen ausführlicher erklärt und anhand von beispielhaften Implementierungen der entsprechenden Algorithmen in Computerprogrammen, die mit einer Ausnahme (Fortran) alle in „C“ geschrieben sind, veranschaulicht. Am Ende eines jeden Kapitels findet der Leser eine Zusammenfassung, Aufgaben und Projekte. Quellprogramme sowie Hinweise und stichpunktartige Lösungen der Problemstellungen sind im Internet auf der Website des Autors erhältlich.

Wie der Titel schon andeutet, bezeichnet der Autor Physiker, Chemiker, Mathematiker und Biologen, die sich mit computergestützten Rechenverfahren beschäftigen, als die Zielgruppe seines Buchs. Die Beispiele und eigentlich die gesamte Abhandlung sind allerdings sehr physikorientiert. Unter dem Aspekt der Chemie und Biologie wird das Thema kaum beleuchtet. Dies wird beispielsweise augenfällig, wenn Monte-Carlo-Simulationen mit den Worten „Monte Carlo simulations are usually associated with electron scattering processes in semiconductors“ vorgestellt werden. Dies spiegelt die Forschungseinstellung des Autors auf dem Gebiet der Quantenelektronik und der Halbleiterphysik wider, berücksichtigt jedoch in keiner Weise die große Bedeutung dieser Methoden in anderen Bereichen. So spielen Monte-Carlo-Simulationen eine herausragende Rolle in der Chemie und werden in Molekülmechanik-Untersuchungen genutzt. Darüber erfährt der Leser allerdings nichts. Das Kapitel über Moleküldynamik (MD), in dem fast ausschließlich Anwendungen aus der Festkörperphysik beschrieben werden, offenbart ebenfalls die starke Neigung des Autors zur Physik. Die Bedeutung von MD-Methoden in der Chemie wird nur kurz erwähnt, obwohl MD-Simulationen heutzutage in vielen Hochschul- und Industrielaboratorien zur Vorhersage von Eigenschaften potentieller Arzneistoffe und Reagentien immer häufiger verwendet werden. Zudem sind einige, die Chemie betreffende Informationen falsch, z.B. die Behauptung in Abbildung 8.12, die C-H- und H-H-Bindungen seien schwächer als eine C-C-Einfachbindung.

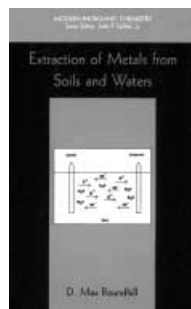
Alles in allem ist das Buch Studierenden zu empfehlen, die sich für computergestützte Rechenmethoden in der Physik interessieren. Für Chemiker und Biologen scheint es weniger geeignet, denn erstens ist zum Verständnis des Inhalts viel physikalisches Hintergrundwissen notwendig und zweitens fehlt der Bezug der beschriebenen Anwendungen zu diesen Disziplinen.

Wolfram Koch

Gesellschaft Deutscher Chemiker  
Frankfurt a. M.

**Extraction of Metals from Soils and Waters.** Von *D. Max Roundhill*. (Serie: Modern Inorganic Chemistry.) Kluwer Academic/Plenum Publishers, New York 2001. 375 S., geb. 127,00 €.—ISBN 0-306-46722-4

Mit *Extraction of Metals from Soils and Waters* erscheint endlich ein Werk, in dem dieses Thema aus dem Blickwinkel der Anorganischen und Koordinationschemie betrachtet und der Stand der Forschung und Entwicklung zusammengefasst wird. Um es vorwegzunehmen, dieses dritte Buch von Max Roundhill in der Serie „Modern Inorganic Chemistry“ spricht sowohl den Forscher als auch den Anwender gleichermaßen kompetent an. Zusammen mit dem logischen und sehr systematischen Aufbau ergibt sich ein gut lesbarer Text. Durch die Gliederung nach Methoden sowie nach Schwermetallen gewinnen beide Lesergruppen einen guten Überblick und finden rasch die sie interessierenden Informationen. Dabei kann der Anwender sowohl zwischen den Methoden, deren Vor- und Nachteile jeweils aufgezeigt werden, als auch zwischen den einzelnen Liganden, z.B. entsprechend der geforderten Metallselektivität, wählen. Der Forscher hingegen kann seine eigenen Ergebnisse mit vielleicht besseren Liganden oder Verfahren in den Kontext der angeführten Ergebnisse einordnen. Daher ist es sinnvoll, dass außer den Verfahren, die bereits im Feldver-



such getestet wurden, auch interessante Forschungsergebnisse angeführt werden, die sich noch im Laborstadium befinden. Die zitierten Literaturstellen können wegen der Fülle des Materials freilich nur einen kleinen Teil der Aktivitäten repräsentieren, erlauben dem Leser jedoch den weiteren Einstieg in die Thematik. Es handelt sich um ein aktuelles Forschungsgebiet, da die Sanierung von schwermetallbelasteten Böden und Wässern weiter an Bedeutung gewinnt und kaum ausgereifte Verfahren existieren.

Fünf der 13 Kapitel widmen sich schwerpunktmäßig den bedeutendsten Methoden: Im Kapitel über Phasentransfer-Extraktion und Adsorption werden auf 20 Seiten wichtige Verfahren (Gleichgewichte, Tenside, wässrige Zweiphasensysteme, Flüssigmembranen, Ionenaustausch, Polymerfiltration, Adsorption an festen Phasen bzw. Polymeren/Biopolymeren) zusammengefasst und deren Grundlagen und Prinzipien erläutert. Die beiden Verfahren Bodenwäsche und In-situ-Stabilisierung einschließlich der elektrochemischen Metallabscheidung unter dem Einfluss von Komplexbildnern werden auf 10 Seiten abgehandelt. Die elektrokinetische Extraktion ist das Thema eines 10-seitigen Kapitels, in dem die Methode selbst und ihre Anwendung auf Ionen und Verbindungen toxischer Schwermetalle (Cr, Cd, Cu, Pb, Hg, U) beschrieben werden. Dem Design von selektiven Liganden sind gut 30 Seiten gewidmet, in denen verschiedene Klassen mehrzähliger Liganden, Makrocyclen, Calixarene und Liganden für die Extraktion mit überkritischem CO<sub>2</sub> vorgestellt werden und auf deren Vorteile und Grenzen eingegangen wird. In einer Zeit zunehmend interdisziplinären Arbeitens ist das Kapitel über pflanzliche und biologische Reinigung von Böden und Wässern eine wertvolle Ergänzung, zumal das Potential der Methode deutlich wird. Wohl um den Umfang des Buches nicht zu sprengen, beschränken sich die meisten Beispiele in diesem Kapitel auf die Anwendung von (auch genetisch veränderten) Pflanzen und Mikroorganismen zur Schwermetallentfernung aus Böden. Die Absorption oder Aufnahme durch Algen, Chitosan oder anderen Biomassen zur Abwasserbehandlung wird nur sehr kurz erwähnt, auch die Auswahl an