

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

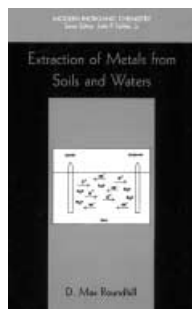
Gesellschaft Deutscher Chemiker
Frankfurt a. M.

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 CO₂ 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



Literaturstellen erscheint hier unausgewogen.

Das zweite Schwerpunktthema des Buches – die Extraktion von Ionen toxischer Schwermetalle (Hg, Pb, Cd, Cu, Cr, Actinide/Lanthanide) und anderer Metalle (Ag, Au, Alkali/Erdalkali) – wird in 6 Kapiteln ausführlich behandelt. Die Einordnung der Ergebnisse nach Ligandenklassen (einzählige Liganden, Chelatbildner geordnet nach der Art der Donoratome, Makrocyclen, Liganden bei Verwendung von überkritischem CO_2 u.a.) erleichtert den Vergleich und das Auffinden anhand des Registers. Die Strukturformeln der Kronenether, Aza-, Thiakronen und Calixarene sind gut lesbar. Der Zusammenhang zwischen Molekülstruktur und Komplexstabilität bzw. Selektivität wird teilweise mit Daten (K_{ex} , extrahierte Menge in %) veranschaulicht. Auch angrenzende Themen werden angesprochen: Wie gelangen die Schwermetalle in den Boden, wie liegen sie dort vor, wie gelangen sie in die Nahrungskette, und wie können Vergiftungen behandelt werden. Zwar ist bei manchen der angeführten Liganden fraglich, ob sie je zur Sanierung eingesetzt werden, z. B. wegen aufwändiger Synthesen oder einer gewissen Wasserlöslichkeit. Interessant ist jedoch das molekulare Design, das zu ihrer Selektivität führt. Es bleibt freilich dem Leser überlassen, zu entscheiden, welcher Ligand für eine Übertragung und ein Scale-up der Laborversuche auf die jeweiligen realen Proben geeignet sein könnte oder welche Struktur solch ein Komplexbildner haben müsste: Wegen der unterschiedlichen Matrices, den jeweils erforderlichen Selektivitäten sowie der zahlreichen Liganden muss die Methode dem jeweiligen Problem angepasst werden. Besonders für die selektiven Makrocyclen gibt es erst wenige Ergebnisse aus Feldversuchen, mehr dagegen für die bekannten Chelatbildner wie EDTA und NTA.

Auf je 20 Seiten werden Hg(II)- und Pb(II)-selektive Komplexbildner, Säulenmaterialien und Extraktionsmittel vorgestellt sowie verwandte Probleme wie elementares Quecksilber und Analysemethoden für Blei behandelt. Der auflockernde Abschnitt, in dem dargelegt wird, dass man sich durch Einnahme von größeren Mengen Papier mit Pb(II) vergiften kann, ist freilich sehr kurz gefasst.

10 bzw. 15 Seiten befassen sich mit Liganden für Cd(II) und Cu(II). Ihres Wertes bei einer Rückgewinnung wegen wurden auch Silber und Gold aufgenommen, was auch deshalb von Interesse ist, weil neue Liganden vielleicht mit dem Cyanid-Ion bei der Gewinnung konkurrieren können. Das Kapitel zu Lanthaniden/Actiniden beschreibt auf 30 Seiten deren Extraktion und Komplexbildung vor dem Hintergrund der Entfernung radioaktiver Kontaminationen.

Dem Design von Liganden für Anionen (Schwerpunkt Cr, daneben Se, Tc, kein As) sowie Ergebnissen zu Komplexbildung und Extraktion sind ca. 10 Seiten gewidmet. Hier finden sich auch einige Querverweise zu anderen Kapiteln, in denen Methoden anhand von Beispielen erläutert werden.

Auf über 30 Seiten werden Alkali- und Erdalkalimetallionen-selektive Kronenether, Cryptanden und Calixarene behandelt. Dies ist zwar, mit Ausnahme von ^{137}Cs und ^{90}Sr , nicht primär für die Bodensanierung von Interesse, weil diese Ionen ja gerade im Boden verbleiben sollen, aber für das Design selektiver Liganden und die Analytik sehr lehrreich.

In fast allen Kapiteln wird neben der chemischen Trennung auch die Analytik berücksichtigt: Selektive Liganden eignen sich, ggf. nach Modifizierung, auch zum quantitativen Nachweis der im Boden verbliebenen Schwermetalle. Auf dieses Thema wird in dem 50-seitigen letzten Kapitel über optische und Redoxsensoren für Metallionen noch einmal gesondert eingegangen. Hier werden sowohl die Mechanismen der Umsetzung in ein Analysensignal als auch die Ligandenklassen (Chelatbildner, Makrocyclen, Kronenether, anionenselektive Liganden u.a.) vorgestellt. Beispiele für den Nachweis von Metallionen und biologische Anwendungen runden das Kapitel ab. Da fast jeder wasserunlösliche Ligand zu einer ionenselektiven Elektrode verarbeitet werden kann, muss auf die Potentiometrie hier natürlich nicht eingegangen werden.

Die zitierte Literatur reicht hauptsächlich bis 1999, teilweise bis 2000 (z. B. ACS-Symposien). Sie kann wegen der Dynamik des Forschungsgebiets nur einen Ausschnitt und einen Teil der

beteiligten Arbeitsgruppen widerspiegeln. Das Buch kombiniert Ergebnisse zur Komplexbildung mit ihren Anwendungsmöglichkeiten und bringt so dem Chemiker den angewandten Aspekt seiner Forschung näher. Es zeigt andererseits dem Anwender, dass er sich mit den wenigen kommerziellen Verfahren nicht zufrieden geben muss, wenn er den Komplexchemiker zu Rate zieht.

Rainer Ludwig

Institut für Chemie

Anorganische und Analytische Chemie
der Freien Universität Berlin

Glycochemistry. Principles, Synthesis, and Applications. Herausgegeben von Peng George Wang und Carolyn R. Bertozzi. Marcel Dekker, New York 2001. 682 S., geb., 195.00 \$.—ISBN 0-8247-0538-6

Mit der vorliegenden, 682-seitigen Monographie *Glycochemistry* erheben die Herausgeber und die beteiligten Autoren einen recht hohen Anspruch. Sie wollen nämlich eine umfassende Übersicht über das weite Gebiet der modernen Glycochemie in einem einzigen, zusammenfassenden Band geben und dem Leser eine aktuelle Literaturübersicht zu den neuesten Entwicklungen dieses Gebiets bieten. Wir werden sehen, ob ihnen dies gelungen ist?

Der Untertitel des Buches deutet darauf hin, dass die einzelnen Beiträge in drei größere Abschnitte eingeteilt sind. Im ersten Abschnitt finden sich insgesamt sechs Kapitel, die sich mit der chemischen Synthese komplexer Oligosaccharide befassen. Im Vorwort teilen die Herausgeber mit, dass der Leser hier umfassende und zeitgemäße Beiträge geboten bekäme. Zwar trifft dies meines Erachtens auf jeden Beitrag durchaus zu, gilt aber sicherlich nicht uneingeschränkt für das riesige Gebiet der chemischen Oligosaccharidsynthese im Allgemeinen. Im ersten Kapitel (32 Seiten, 71 Literaturzitate) gibt Peter

