

Im weiteren Verlauf werden verschiedene Beispiele von Potentialflächen behandelt. Bereits sehr kleine Cluster werden durch eine große Zahl stationärer Punkte beschrieben. Speziell werden zwei eindimensionale Darstellungen von mehrdimensionalen Potentialflächen diskutiert. Es wird aufgezeigt, wie man über die monotone Folge von Sequenzen lokaler Minima und dazwischen liegender Übergangszustände zu den tief liegenden Minima gelangt. Bei  $\text{Ar}_{19}$  und  $(\text{KCl})_{32}$  wird anhand dieser monotonen Folgen erklärt, warum im ersten Fall die Struktur in einem der lokalen Minima der Potentialfläche abgefangen wird und warum es dem zweiten System leicht gelingt, in die Steinsalz-Form überzugehen. Sehr informativ sind Diskonnektivitätsgraphen, die als Palmen-, Weiden- und Feigenbaumdiagramme dargestellt werden. Sie geben Auskunft über die Zustände höchster Energie, die bei einem Übergang zwischen zwei Minima durchlaufen werden. Viele interessante Beispiele von Clustern und Biomolekülen werden vorgestellt. Die Graphen liefern Angaben über die Fähigkeit eines Systems, die Zustände niedriger Energie zu erreichen. Es stellt sich heraus, dass ein Vergleich der Potentialflächen mit den Energieflächen der freien Energie komplementäre Informationen liefert, die in manchen Fällen schwer kombinierbar sind.

Einige der wichtigsten numerischen Methoden zur Analyse von Energieflächen sind im folgenden Kapitel zusammengefasst. Insbesondere zum Auffinden von Übergangszuständen sind sehr anspruchsvolle Algorithmen notwendig. Der Leser findet hier Beschreibungen der gebräuchlichsten Algorithmen wie die Eigenvektor-Following-Routine. Ebenfalls eingeführt werden Standardmethoden zur Bestimmung thermodynamischer Eigenschaften. Ein weiterer Punkt bei der Potentialflächenanalyse ist die Suche nach Zuständen niedriger Energie, die bei tiefen Temperaturen relevant werden. Entsprechende Rechen-techniken wie genetische Algorithmen und paralleles Tempern werden kurz abgehandelt.

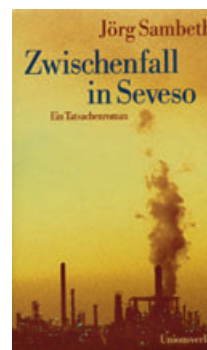
Anhand der Merkmale von Potentialflächen lassen sich Vorhersagen der thermodynamischen und dynamischen Eigenschaften treffen. An gut ausge-

wählten Beispielen wird demonstriert, wie man Master-Gleichungen ableiten kann, die das dynamische Verhalten in Form von Eigenschaften der einzelnen Minima und Übergangszustände ausdrücken. Auf diese Weise ist es z.B. möglich, die Isomerisierungsgeschwindigkeit kleiner Wassercluster zu berechnen. Die letzten drei Kapitel bieten einen Überblick über Anwendungen von Potentialflächen zur Analyse von Clustern, Biomolekülen und unterkühlten Flüssigkeiten. Erfreulich sind die sehr aktuellen Literaturverweise und die gelungene Auswahl von Beispielsystemen.

*Energy Landscapes* präsentiert auf 681 Seiten eine zeitgemäße Anleitung zur systematischen Herangehensweise an komplexe Systeme. Inhaltlich tiefgehend und mit großer Detailfülle beleuchtet es alle wesentlichen Aspekte von Potentialflächen, Minima und Übergangszuständen. Eine umfangreiche Bibliographie mit mehreren Tausend Verweisen rundet den hervorragenden Eindruck ab. Die meisten Kapitel sind für eine breite Leserschaft aus der Physik und Chemie geeignet, bei der Lektüre der drei letzten Kapitel sollten Vorkenntnisse vorhanden sein. Das Buch ist die erste Monographie zum Thema und wird daher lange als Referenzwerk fungieren. Besonders jungen Wissenschaftlern, die sich mit Potentialflächen komplexer Systeme vertraut machen möchten, wird es wertvolle Dienste leisten.

Andreas Heuer  
Institut für Physikalische Chemie  
Universität Münster

## Zwischenfall in Seveso



Ein Tatsachenroman. Von Jörg Sambeth. Unionsverlag, Zürich 2004. 320 S., Broschur, 24.80 €.— ISBN 3-293-00329-X

Dieses Buch ist ungewöhnlich – mit ungewöhnlichem Sujet, ungewöhnlich in seiner erstaunlichen Diskrepanz zwischen subjektivem Erleben und angeblich objektiver Schilderung, und es ist ungewöhnlich schlecht geschrieben! Dieses Zusammentreffen nachteiliger Epitheta ist gut zu begründen.

Der Autor, Jörg Sambeth, war laut Klappentext technischer Direktor der Givaudan, zu dessen Zuständigkeitsbereich „... auch das Werk Icmesa in Seveso, wo 1976 der Dioxin-Unfall geschieht“, gehörte. Er war damit Verantwortlicher der Givaudan, obwohl ein Teil der Schilderung der damaligen Vorfälle ganz offensichtlich auch bei Hoffmann-LaRoche spielt, der Muttergesellschaft von Givaudan. Diese Verschleierungstechnik des Proszeniums ist möglicherweise bewusster Teil des „Tatsachenromans“, dessen Arbeitsweise der Autor unter anderem wie folgt charakterisiert: „... zwischen Wirklichkeit und Fantasie habe ich mir die Freiheit genommen, um meine Wahrheit darzustellen ...“ – und in der Tat, zwischen Fantasie und Wirklichkeit spielt sich bei ihm vieles ab, nur bleibt der Leser im Unwissen, auf welcher Ebene und mit welcher Absicht der Autor jeweils „Facts and Fiction“ verwechselt und je nach Gusto verbreitet.

Ein Tatsachen-Roman ist eben dem Ernst der Vorgänge nicht angemessen. Zur Erinnerung: Am 10. Juli 1976 wurde aus einem Reaktor der Icmesa das extrem giftige 2,3,7,8-Tetrachlordibenzo-1,4-dioxin (TCDD, in der Umgangssprache kurz „Dioxin“ genannt) freigesetzt. Das frei zugängliche Schrifttum hält sich in der Bewertung der Ursachen auffallend zurück und spricht

zum überwiegenden Teil von „Überhitzungsreaktionen, die einen Überdruck im System erzeugten und das Sicherheitsventil zerstörten“ – so die Darstellung der Ärzte ohne Grenzen, einer sicher nicht als Beschöniger bekannten Organisation. Die schrecklichen Folgen der Explosion werden im Umweltlexikon der „Katalyse“ unter anderem wie folgt geschildert: „... durch Verhüllungs- und Desinformationspolitik wurde erst am 17. Tag nach der Explosion mit der Evakuierung begonnen ...“. Der Vorfall, kein Ruhmesblatt der Chemie im Allgemeinen und schweizer Unternehmen im Besonderen, ist also sehr schwerwiegend und in der Folge auch Anlass von Aktivitäten gewesen, solche Unfälle zuverlässig zu vermeiden. Die erste Direktive der EU (Council Directive 82/501/EC) hat mit den Erkenntnissen der Chemieunfälle in Bhopal und in Basel (Rheinwasservergiftung durch die Sandoz AG) zur jetzt gültigen Directive Seveso II der EU geführt. Aber alle zugänglichen Berichte (vielleicht die Gerichtsakten ausgenommen) sprechen keine eindeutige Sprache, warum es zum Unfall kam.

Mit dieser Vorgeschichte wäre nur ein Tatsachen-Bericht eines der Beteiligten angemessen gewesen – etwas spät mit 28 Jahren Verzögerung, aber immerhin; man könnte diesen Zeitverzug gutwilligerweise auch als das Verstreichen einer vielleicht strafgesetzmäßig relevanten und für den Autor entscheidenden Verjährungsfrist deuten. Aber weit gefehlt: Alle für die Beurteilung durch den Leser bedeutsamen Informationen werden entweder nach Andeutung sofort verschleiert (etwa die genaue Kette der Verantwortlichkeiten, eine für einen technischen Direktor und jetzt auch für den Leser immerhin wichtige Information), oder sie werden hinter Andeutungen verborgen (etwa der Verdacht, dass an Wochenenden illegale Produktionsruns unter irregulären Produktionsbedingungen mit dem Ziel der Herstellung von Chemiewaffen durchgeführt wurden – Wer? Für wen? War das Sicherheitsventil manipuliert? Warum und wann?). Hinzu kommt eine krude Mischung aus Minderwertigkeitsgefühlen des Autors und Kolportage: Diese eigenartigen Schweizer, von denen ja bekannt ist, dass sie Österreicher (im Buch verschiedentlich als „Rot-

weißrote“ bezeichnet) hinterrücks ermorden (Geßler, ca. 1470) oder dass sie völkerrechtswidrig ein stehendes Heer von Landsleuten in fremden Ländern unterhalten (Schweizer Garde im Vatikan), regieren nach Schilderung des Autors als Manager wahlweise in einer schwülen Atmosphäre zwischen luxuriösem Abendessen und Betriebsingenieurs-Nacktschau (beim Anfahren der Anlage in Seveso, S. 18 f.) oder einem „kleinen Spielchen im Casino“ nach dem Genuss von Jahrgangschampagner (nach einer Jubiläumsfeier, S. 43 f.).

Bei diesem Szenario ist es nicht verwunderlich, dass sich (fast) alle Vorgesetzten und auch Kollegen des Autors im Laufe der Schilderung als ausgesprochene Widerwarte mit menschenverachtendem Verhalten herausstellen: Sie tricksen, geben wider besseren Wissens nur Teilinformationen weiter und sind auf jeden Fall nicht in die Verantwortungskette eingebunden. Der Autor lässt seine Vermutung einfließen, dass bereits bei seiner Einstellung der Plan bestand, ihn zu vernichten: „... die heiklen Dokumente und Hinweise auf bewusstes Sparen sind darin nicht zu finden ...“ und „... Nichts mehr zu tun? – Ja, sicher“ (bei der Vorbereitung der Seveso-Aufgabe) und nach dem Einstellungsgespräch beim Generaldirektor seine Interpretation zu den Gedanken seines obersten Chefs: „... Der Typ ist genau richtig für mich. Er wird keine dummen Fragen stellen.“

Bei dieser Einstellung geht alles seinen geregelten Gang in die Katastrophe und die menschliche Vernichtung des Autors. Die Geschichte der Aufarbeitung der Vorfälle und die Vorbereitung der Gerichtsverhandlungen sind interessante Dokumente, die sicher im Endeffekt die geschilderte Konsequenz hatten. Sambeth schildert alles rückhaltlos, vor allem sich selbst nicht schonend. Dem Leser drängt sich auf fast jeder Seite und trotz nicht zu leugnenden Mitleids allerdings der Eindruck einer von Anfang an schwer gestörten Vorgesetzten-Mitarbeiter-Beziehung auf, die in dieser Konsequenz immer unerträglich gewesen sein muss. Der Leser sieht es wie die (später verstorbene) Frau des Autors kommen: „... Weil du dabei bist, dich von ihnen abhängig zu machen“ und „Verlasse den Konzern“ –

er ist also frühzeitig gewarnt. Wenn man dann unterstellt, dass der Autor der oben genannten Definition seines Tatsachenromans folgt und „seine Wahrheit darstellt“, dann kann man ihn selbst bei gutwilligster Auslegung seines Handelns nicht von einem gewissen Anteil an Schuld (und schon gar nicht von Torheit) freisprechen.

Sambeth nennt die Vorgänge eine „tragische Farce“, „deren Ende undramatisch“ sei. Aber selbst dabei kommt er nicht ohne Mystifikation aus: Der Leser erfährt nur aus der Formulierung, dass „der Konzern bei der Abfindung nicht knausert“, dass er die Givaudan verlassen hat (oder verlassen musste?) – etwas später deutet er etwas anderes an: „Warum lässt (die Firma) ihn trotz seines bekannten Einsatzes ... gehen?“ – ist das die unausgesprochene Kündigung, von der Sambeth schreibt (übrigens von sich selbst immer in der dritten Person)? Wie alle Halbandeutungen des Autors landen auch diese Ausführungen in einer informativen Sackgasse, die den Wert des Buches, das ein Highlight hätte sein können, auf nahezu null reduzieren.

Sambeth hatte die Chance, Informationen aus erster Hand zu diesem historischen Unfall der Chemiegeschichte beizusteuern – er hat sie nicht adäquat genutzt. Dass er „seiner Wirklichkeit“ zu großen Raum gibt und sie sogar – unglaublich – romanhaft schildert, diskreditiert das gesamte Vorhaben und macht das Buch nicht lesenswerter.

Boy Cornils  
Hofheim im Taunus

**DOI: 10.1002/ange.200485270**