

Wirtschaft, Technik und Wissenschaft der deutschen Chemie von 1914–1945 (Bernardus-Verlag, 2001) und dabei besonders auf das Kapitel „Die chemische Großindustrie und die Giftgase“, S.307 ff., ein.

Der Autor beschreibt detailliert die Forschungen zum „N-Stoff“, den die Naziführung gemeinsam mit den IG Farben als „Wunderwaffe“ zum Einsatz bringen wollte. Es handelt sich um das Chlortrifluorid ClF_3 , das Otto Ruff 1930 durch Umsetzung des von ihm 1928 gewonnenen Chlormonofluorids mit überschüssigem Fluor erhalten hatte und das später als Brand- und Zündmittel militärisch eingesetzt werden sollte – glücklicherweise erfüllten sich die hohen Erwartungen nicht. Als sich herausstellte, dass die von Gerhard Schrader (1903–1990), einem Chemiker der IG Farben, erstmals hergestellten phosphororganischen Kontaktinsektizide (1936) als hochwirksame Nervengifte militärische Bedeutung erlangen konnten, konzentrierte sich die Kampfstoff-Forschung im Vorfeld und in den ersten Jahren des 2. Weltkrieges überwiegend auf die bereits in sehr geringen Dosierungen giftigen Substanzen Tabun, Sarin und später auf das von Richard Kuhn, Chemienobelpreisträger 1938, entwickelte noch weitaus toxischere Soman (1944). Schmaltz versteht es überzeugend, die in die Kampfstoff-Forschung involvierten Chemiker, Industriellen und Militärs in ihrer ambivalenten Haltung zum Einsatz von Giftgasen im Kriege treffend zu charakterisieren. Es waren nicht moralische Skrupel, die die NS-Führung und ihre wissenschaftlichen Partner auf einen militärischen Einsatz dieser neuen Generation von Kampfgiften und einiger traditioneller Gase verzichten ließen, sondern es war die Furcht vor möglichen Gegenschlägen durch alliierte Luft- und Bodentruppen. Der Autor schildert die Biographien solcher Wirtschaftsführer wie Carl Krauch und Otto Ambros von den IG Farben, des Chemikers Richard Kuhn und des Pharmazeuten Horst Böhme sowie der Altnazis Thiessen und Mentzel, beide mit höchsten Führungsfunktionen im Kaiser-Wilhelm-Institut betraut. Sie alle dienten uneingeschränkt einem verbrecherischen politischen System, und ihnen war und blieb fremd, was der Friedensnobelpreisträ-

ger von 1995 Sir Joseph Rotblat (1908–2005) wie folgt formulierte:

„There are other principles that override it [providing new knowledge, K.M.], humanitarian principles. Scientists must always remember that they are human beings first, scientists second. And adherence to ethical principles may sometimes call for limits on the pursuit of knowledge“.

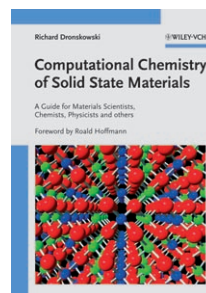
Schmaltz hat sich gründlich mit dem schwierigen Thema einer objektiven Bewertung des Spagats der in Deutschland verbliebenen Chemiker zwischen vermeintlicher Pflichterfüllung und würdevoller menschlicher Haltung befasst; freilich fehlt auch ein Blick auf die wenigen zivilen Helden in Deutschland, „Tausende unter 80 Millionen“, wie Eugen Kogon (1903–1987) bitter schreibt (*Frankfurter Hefte*, April 1946, S. 126). Was die fachliche Seite des insgesamt lesenswerten Buches betrifft, so wäre eine gründlichere Darstellung der chemischen Sachverhalte hilfreich gewesen – neben Fehlern bei Formelbild (S. 488) und -bezeichnung (S. 446) sowie in den Texten auf S. 461 (Glykolyse) und Fußnote 419, S. 447 (erste Zeile) ist zu kritisieren, dass es nur sehr wenige Formelbilder der im Buch behandelten Kampfstoffe gibt. Ärgerlich ist die falsche Schreibweise des Begründers der phosphororganischen Chemie A. E. Arbusov (1877–1968) auf S. 434 und S. 668 sowie das Durcheinander bei dem Versuch, kyrillische Texte zu transkribieren bzw. zu transliterieren (S. 627) – auf eine der beiden Varianten muss man sich – und dann korrekt – festlegen.

Es ist zu hoffen, dass die nach 1945 ins Arsenal der Siegermächte des 2. Weltkrieges integrierten Nervengifte ganz im Sinne des nach dem Ende des Kalten Krieges viel zu spät verabschiedeten Gesetzes zu dem „Übereinkommen vom 13.1.1993 über das Verbot der Entwicklung, Lagerung und des Einsatzes chemischer Waffen“ nicht mehr zu den, wie Schmaltz treffend schreibt (S. 612), belastenden Erbschaften des NS-Regimes gehören. Und man kann nur John Cornwell zustimmen, wenn er uns Wissenschaftler von heute eindringlich mahnt (l.c., S. 461–462): „Doing good science today involves a principled vigilance for consequences, an awareness of the impact of scientific

discovery on society, on the environment, on nature.“

Klaus Möckel
Mühlhausen

Computational Chemistry of Solid State Materials



A Guide for Materials Scientists, Chemists, Physicists and others. Von Richard Dronskowski. Wiley-VCH, Weinheim 2005. 294 S., Broschur, 99.00 €.—ISBN 3-527-31410-5

Schon bevor interdisziplinäre wissenschaftliche Forschung in Mode kam, war die Festkörperforschung ein Bereich, in dem Chemiker, Physiker, Materialwissenschaftler und Ingenieure gemeinsam Grundlagenforschung betrieben und neue Techniken entwickelten. Die Grenzen zwischen diesen Disziplinen blieben dabei sehr wohl bestehen, und jede entwickelte ihre eigene Denk- und Vorgehensweise, aber auch ihre eigene Fachsprache. Ein wirksamer Gedankenaustausch zwischen den Disziplinen, der nicht an sprachlichen Barrieren scheitert, ist aber eine Voraussetzung, um zu echten Fortschritten in der Wissenschaft zu gelangen. Im Vorwort dieses Buches kommentiert Roald Hoffmann dies mit Blick auf die Chemie und Physik so: „Es ist interessant, wenn zwei gereifte Wissenschaften durch Gegebenheiten der Natur und einen gemeinsamen Forschungsgegenstand gezwungen werden, sich mit ihren gegenseitigen Denkweisen auseinanderzusetzen, die doch beide zu Ergebnissen führen ... und doch scheinbar unvereinbar sind.“ Der gemeinsame Forschungsgegenstand ist nach Hoffmann der Festkörper, und er weist darauf hin, dass die Zukunft von „Computertechniken geprägt sein wird, ... die die Erfordernisse von sowohl Chemikern als

auch Physikern berücksichtigen.“ Man könnte dieses Konzept auch auf wissenschaftliche Ansätze übertragen – mit dem Experiment auf der einen, der Theorie auf der anderen Seite. Das Experiment liefert Daten, aus denen Theorien entwickelt werden, die verifiziert, modifiziert oder verworfen werden. Umgekehrt liefert die Theorie Hypothesen für weitere Experimente. Werden Wissenschaftler auch gewöhnlich in „Experimentatoren“ oder „Theoretiker“ eingeteilt, so sind es oft genug die Praktiker, die neue Theorien formulieren, und die Theoretiker, die neue Experimente vorschlagen. Mehr noch ändern sich die Zeiten, da immer mehr Wissenschaftler Experiment und Theorie kombinieren, indem sie computergestützt arbeiten.

Ziel vorliegenden Buches ist es, Chemikern, Physikern und Materialwissenschaftlern eine allgemeine Grundlage für theoretische Untersuchungen und Berechnungen von Festkörpern zu vermitteln. Der sauber verfasste Text beginnt mit einer Einführung zu klassischen und quantenmechanischen Theorien, geht dann über zu Beschreibungen von Rechenmethoden und schließt mit zahlreichen Beispielen aus den eigenen Arbeiten des Autors, die auf Struktur (auch Strukturvorhersage), Zusammensetzung, physikalische Eigenschaften und thermodynamische Daten von Festkörpern eingehen. Das Buch ist hervorragend geschrieben und ermöglicht auch Studierenden und Wissenschaftlern, die mit Festkörpertheorien wenig vertraut sind, einen leichten Einstieg in das Gebiet. Spezialisten werden den Ideenreichtum der breitgefächerten Thematik für eigene Denkanstöße zu nutzen wissen.

In Kapitel 1 werden klassische, vorrangig chemieorientierte Grundlagen erläutert: Atom- und Ionenradien, Ionenmodell der chemischen Bindung, Pauling-Regeln, Bindungswalenzmethoden und Volumeninkremente. Besonders hilfreich sind hier die Tabellen mit Daten chemischer Elemente.

Grundlagen der Quantenmechanik stehen in Kapitel 2 im Mittelpunkt. Unter anderem werden die Prinzipien des Molekülorbitalansatzes für kristalline Festkörper erklärt, wobei die Mathematik auf das Notwendigste beschränkt bleibt und viele Abbildungen

den Stoff anschaulich machen. Es folgen Erläuterungen zur Erzeugung von Zustandsdichten, zur Gesamtenergiezerlegung und zu Überlappungsdichten. Weiter geht es mit Austausch- und Korrelationsphänomenen, Dichtefunktionaltheorie, Pseudopotentialen, Zellmethoden, linearen Methoden und Moleküldynamik. Am Schluss des Kapitels findet sich ein wichtiger Abschnitt, der die einschlägigen Computeranwendungen zusammenfasst.

Im Kapitel 3 werden schließlich Anwendungen der zuvor erläuterten Methoden anhand vieler praktischer Beispiele geschildert. Das Kapitel beginnt mit der Optimierung und Erläuterung von Metalloxyd- und Metallnitridstrukturen, im weiteren Verlauf werden dann Strukturverzerrungen in Elementen wie Tellur erklärt, magnetische Eigenschaften von Übergangsmetallen und ihren Verbindungen beschrieben und Verbundstoffe mit Moleküldynamikmethoden charakterisiert. In einem Abschnitt über Carbodiimide und Cyanamide werden Grenzen und mögliche Fallstricke aufgezeigt. Das Kapitel schließt mit Strukturvorhersagen neuer Materialien wie Oxynitride, intermetallische Verbindungen und magnetische Materialien.

In den ersten beiden Kapiteln wird der Stoff auf sehr anschauliche Weise vermittelt, wobei sich mathematische Ausführungen und erläuternde Abbildungen gut ergänzen. Die Fallstudien in Kapitel 3 basieren vor allem auf der Verwendung von Bildmaterial. Eine reichhaltige und umfassende Bibliographie gibt dem interessierten Leser die Gelegenheit, intensiver in eine Thematik einzusteigen.

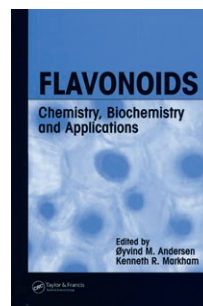
Computational Chemistry of Solid State Materials ist ein hervorragendes Handbuch für Studierende und Forscher, die sich mit Rechenmethoden für Festkörperuntersuchungen beschäftigen. Das Buch ist systematisch geordnet und bietet in verständlicher Weise Einblicke in die erläuterten Techniken. Roald Hoffmann kommt zu dem Schluss, dass „dieses Buch ... gleichsam ein Reisepass für kreative Exkursionen in dieses gemeinsame Gebiet [zwischen der Chemie und Physik] ist“. Zu alledem kommt dieses Buch genau zur rechten Zeit, denn da Rechenmethoden immer leichter zugänglich werden,

bedarf es einer gründlichen Erläuterung von Stärken und Schwächen der vielfältigen in Gebrauch befindlichen Modelle.

Gordon J. Miller
Department of Chemistry
Iowa State University, Ames (USA)

DOI: 10.1002/ange.200585393

Flavonoids



Chemistry, Biochemistry and Applications. Herausgegeben von Øyvind M. Andersen und Kenneth R. Markham. CRC Press/Taylor & Francis 2006. 1237 S., geb., 249.95 \$.—ISBN 0-8493-2021-6

8150! Diese Ziffer markiert die Zahl der bekannten Flavonoide – und ein Ende ist nicht in Sicht. Praktisch alles, was man über Flavonoide wissen muss, ist in den 17 Kapiteln dieses 1237 Seiten starken Buches enthalten. Das Themenspektrum reicht von der Biogenese der Flavonoide, ihren Funktionen in Pflanzen bis hin zu Anwendungen in der Lebensmittelindustrie und Medizin. Die umfangreiche Sammlung von Beiträgen, die allesamt von Fachleuten auf dem jeweiligen Gebiet verfasst wurden, spiegelt die gesamte Chemie dieser Pflanzenmetabolite wider, wobei vor allem auf die Isolierung, Strukturbestimmung, physikochemischen Eigenschaften, Reaktivität und Synthese näher eingegangen wird.

Flavonoide sind sekundäre Naturstoffe, deren aromatischer C₆-C₃-Baustein auf dem Shikimat/Phenylpropionat-Weg erzeugt wird, während der zweite aromatische C₆-Baustein auf dem „polyketidischen“ Acetat/Malonat-Weg entsteht. Damit wird das C₆-C₃-C₆-System auf eine kombinatorische Weise von den vielfältigen Enzymreaktionen der Pflanzen aufgebaut, wodurch die