

BUCHBESPRECHUNGEN

Säure/Basen-Gleichgewichte. Redoxvorgänge. Von R. CHRISTEN, Diesterweg-Salle, Frankfurt 1973, VI, 105 S. m. 24 Abb.; Preis DM 8,80.

Es fällt einem leicht, ein so flüssig geschriebenes Buch, oder besser Büchlein, denn der Umfang ist bewußt knapp gehalten, wie das vorgelegte bis ins Detail zu lesen. Daß es hier gelungen ist, einen nicht ganz einfachen Stoff in eine leicht faßbare, übersichtliche und klare Form zu packen, muß dem pädagogischen Geschick des Autors zugeschrieben werden. Es ist unbedingt zu erwähnen, daß gekonnt einerseits ein sicher nicht weiter Rahmen eingehalten wurde, andererseits aber, wenn notwendig, genügend zusätzliche Informationen angeboten werden, etwa beim Heranziehen von Entropie- und Aktivierungsenergiebetrachtungen bei Gleichgewichten. So ist ein rundherum lobenswertes, eigenständiges Büchlein entstanden, das alle Erwartungen, denen es gerecht werden will, erfüllt. Daß sich der Autor über alles, auch schon längst mehrfach überdachtes, neue Gedanken gemacht hat, geht u.a. daraus hervor, daß hier einmal der Säurebegriff nach Lewis nicht überstrapaziert wird.

Es sind Kleinigkeiten, die es als nachteilig anzusagen gilt: Da wäre vor allem, daß hier für die Konzentrationsangabe nicht wie allgemein üblich eckige, sondern runde Klammern verwendet werden.

Einen Redoxvorgang nur als „Elektronenverschiebung“ zu bezeichnen, ist wohl nicht ganz zutreffend. Besser wäre „Elektronenübergang“. Bei Entzündungstemperaturen den Ausdruck „charakteristisch“ zu benutzen, ist ein wenig irreführend, denn man kommt dabei zu leicht in die Nähe von exakten energetischen Zusammenhängen. Schließlich wäre es, im Blick auf den Leserkreis, vielleicht von Interesse gewesen, ein Bild oder eine Beschreibung einer modernen Einstabelektrode zu bringen.

Wie gesagt, es sind im Grunde Kleinigkeiten und sie verwischen in keiner Weise den guten Eindruck, den man sonst von dem Büchlein bekommen hat.

D. KRUG, Tübingen.

Statistical Thermodynamics. Von B. J. MC CLELLAND, Chapman and Hall, London 1973, XVI, 334 S. m. einigen Abb.; Preis £. 7.00.

Als Einführung in die statistische Mechanik werden zunächst einige Grundbegriffe besprochen. Mit Hilfe der Maxwell-Boltzmann-Statistik wird dann in den folgenden Kapiteln ein Überblick über die Berechnung thermodynamischer Größen für reine

Stoffe und in Mischphasen gegeben. Hierbei wird bei Berechnungen und Ableitungen aus Platzgründen öfters auf in der Bibliographie zitierte einschlägige Literatur verwiesen. Trotzdem bleiben die Zusammenhänge verständlich. Da für diese Berechnung prinzipiell die Quantenstatistik nur für die Berücksichtigung von Energiequantelung und Entartung notwendig ist, folgen einige Kapitel mit Beispielen, bei denen die „klassische“ Statistik zu falschen Ergebnissen führt. Dazu werden Bose-Einstein- und Fermi-Dirac-Statistik abgehandelt. Ausführlich werden die Berechnung von thermodynamischen Funktionen aus spektroskopischen Daten und die Theorie des Übergangszustandes zur Berechnung von Geschwindigkeitskonstanten beschrieben.

Für den Benutzer erweisen sich die umfangreiche Formelsammlung und die zahlreichen Wertetabellen für funktionale Zusammenhänge einiger thermodynamischer Größen als nützlich, besonders wenn er praktische Probleme lösen will, wie vom Verfasser angeregt wird. Aus diesem Grunde sind auch der mathematische Anhang, die ausgeführten Bezeichnungsbeispiele und die sehr zahlreichen Übungsaufgaben zu begrüßen. Der Leser kann jedenfalls Erfahrung für die in der Praxis notwendigen Berechnungen sammeln und den Grundstock für weiteres vertieftes Studium dieses Gebietes legen.

G. GAUGLITZ, Tübingen.

Physikalische Chemie. Von W. J. MOORE, D. O. HUMMEL, Walter de Gruyter, Berlin 1973, XVI, 1134 S. m. 411 Abb.; Preis DM 78.-.

Schon die vorangegangenen englischen Auflagen waren wegen ihrer günstigen Stoffauswahl, der klaren Darstellung und besonders wegen der vielen instruktiven Abbildungen und Tabellen auch bei deutschen Studenten sehr beliebt. Daher ist es zu begrüßen, daß endlich eine deutsche Fassung für viele ein eingehenderes Studium ermöglicht. Obwohl diese Fassung – nicht zuletzt durch Erweiterungen in einzelnen Kapiteln – auf die stattliche Zahl von 1100 Seiten angewachsen ist, erscheint der Preis von DM 78.- für ein Lehrbuch doch so hoch, daß dieses Buch kritischer als die vergleichsweise billigeren englischen Fassungen bewertet werden muß. Erfreulicherweise wurden vom Übersetzer einige Kapitel überarbeitet und sogar einige neu aufgenommen, z.B. über Strahlenchemie und Magnetismus. Allerdings stimmen in dem Kapitel über Magnetismus die für verschiedene physikalische Größen verwendeten Symbole teilweise nicht

mit denen an anderen Stellen des Buches benützten überein, wodurch für den Studierenden das Verständnis erschwert wird. Gerade in diesem Zusammenhang macht sich das Fehlen einer Sammlung der physikalischen Größen und der für sie verwendeten Symbole bemerkbar. Daß das Sachregister den Nachschlagenden sehr häufig enttäuscht, ist wesentlich schwerwiegender, da gerade durch die weitgespannte Übersicht über eigentlich alle Gebiete der physikalischen Chemie dieses Buch oft über den Rahmen eines Lehrbuches hinausgeht und zum Nachschlagen ermuntert. Neben den stellenweise schwachen, allzuwörtlichen Übersetzungen verwirren den Leser jedoch auch recht eigenwillige Interpretationen wie Verteilungsfunktion für partition function statt Zustandssumme, oder die doch wohl ungebräuchliche Übersetzung von „stopped-flow“-Methode durch „unterbrochenes Fließen“. Als weiterer Mangel muß empfunden werden, daß häufig übliche deutsche Fachausdrücke fehlen; so wird z. B. ausführlich die Methode des „detailed balancing“ behandelt, der Begriff detailliertes Gleichgewicht aber nicht erwähnt. Es fehlt auch der Begriff der Hypothese des (quasi-) stationären Zustandes (steady state) im Text und Register. In diesem Zusammenhang wird zwar von stationären Zuständen gesprochen, im Sachregister fehlt aber der Hinweis auf die entsprechende Stelle, es wird nur auf stationäre Zustände bei Fließsystemen verwiesen. Zwar wird das Uranyl-Aktinometer ausführlich behandelt, dafür wird aber das inzwischen wesentlich gebräuchlichere Parker'sche Aktinometer nur in einem Satz erwähnt.

Trotz dieser aufgeführten Mängel kann die deutsche Fassung des „Moore“ durchaus einem Vergleich mit anderen deutschsprachigen Lehrtexten standhalten, da ein umfassender Überblick gegeben wird. Hinzu kommen auch für an Randgebieten Interessierte viele Hinweise, wie z. B. auf physiologische oder biochemische Anwendungen. Hilfreich sind außerdem die stellenweise doch recht zahlreichen Literaturzitate. Insgesamt gesehen ist diese deutsche Fassung für höhersemestrige Studenten, die das Buch mit der notwendigen Kritik lesen können, durchaus zu empfehlen und wird auch von vielen gerne verwendet, wie aus eigener Erfahrung bekannt ist. G. GAUGLITZ, Tübingen.

Chemie-Programm Säuren und Basen. Von F. DIETZE, E. HOYER, F. LORENZ, W. SEIFERT u. D. WAGLER, Verlag Chemie GmbH, Weinheim/Bergstraße, 1. Aufl. 1972, 107 S. mit 3 Abbn., Preis DM 13,80.

Die vorliegende Schrift ist der erste Band einer neuen Reihe von Lehrbüchern, die es sich zum Ziel gesetzt hat, das herkömmliche Chemiestudium von seiner überwiegend stofflichen Orientierung zu lösen und zu einer rationelleren, dynamischen Betrachtungsweise zu führen. Das Programm *Säuren*

und Basen liefert eine vollständige Darstellung aller bekannten Säure-Base-Theorien, angefangen bei der klassischen Theorie von ARRHENIUS-OSTWALD über die Solvenztheorie, die Arbeiten von EBERT, KONOPIK und USSANOWITSCH, die BRÖNSTED'sche Säure-Base-Theorie (die sehr breiten Raum einnimmt) bis hin zur Säure-Base-Definition von LEWIS einschließlich des Konzepts der harten und weichen Säuren und Basen von PEARSON.

Wie schon aus dem Titel hervorgeht, handelt es sich um kein übliches Lehrbuch, sondern der Stoff wird in ein „Frage-und-Antwort-Spiel“ aufgegliedert, das durch seine besondere Anordnung die intensive Mitarbeit des Lesers erfordert. Eine solche analytische Form führt natürlich leicht dazu, daß der Überblick über das Ganze verlorengeht. Um dieser Gefahr zu begegnen, schließt jedes Kapitel mit einer Zusammenfassung und Kontrollfragen zum behandelten Stoff.

Die inhaltliche Konzeption erscheint dem Rezessenten insofern gut gelungen, als sie von einer allgemeingültigen Definition der Säure-Base-Theorie ausgeht und die einzelnen, sich oft überschneidenden und z. T. sogar scheinbar widersprechenden Theorien (vgl. die unterschiedliche Definition einer starken Säure oder Base nach USSANOWITSCH und in der klassischen Betrachtungsweise) unter einem gemeinsamen Gesichtspunkt darstellt.

Wenn auch das Buch für das Grundstudium der Chemie in seiner heutigen Form etwas zu speziell sein mag, da die Vielfalt der Theorien und Definitionen den Anfänger überfordern könnte, bildet es doch eine ausgezeichnete Grundlage für Seminare und Vertiefungskurse. Es ist zu wünschen, daß das Programm an den Hochschulen rasch Verbreitung findet und sich ein größerer Interessentenkreis damit beschäftigt. UDO KUNZE, Tübingen.

Drug Design, Vol. I. Von E. J. ARIENS, Academic Press, New York 1971, 581 S. m. zahlr. Abbn.; Preis \$ 34,75.

Der erste Band dieser mehrbändigen Monographie vermittelt einen interessanten Einblick in die bisherigen Bemühungen, biologisch aktive Verbindungen auf einer so rationalen Basis wie möglich zu entwickeln; d. h. die Versuchs-Irrtumsfaktoren auf ein absolutes Minimum zu reduzieren. Bei den Versuchen, die Struktur-Aktivitäts-Beziehungen zu interpretieren, sind im wesentlichen zwei Methoden angewendet worden, – die klassischen Methoden, die davon ausgehen, daß bestimmte biofunktionelle Gruppen im Molekül von besonderer Bedeutung für die Wirkung sind, und moderne physiko-chemische Methoden, die das Molekül als Ganzes betrachten und versuchen, den Effekt bioaktiver Verbindungen durch gesamtphysiko-chemische Eigenschaften des Moleküls zu erklären.

In den 7 Kapiteln dieses Buches wird anhand von zahlreichen Beispielen und Abbildungen dargestellt,

wie durch die Benutzung der einzelnen Parameter Einblicke in den submolekularen Mechanismus der Wirkung und damit auch nützliche Hinweise für die Planung und Entwicklung neuer bioaktiver Verbindungen gewonnen werden können.

Die Hälfte des Buches ist einer allgemeinen Einführung in das Gebiet „Drug Design“ gewidmet, in der auf das Vorgehen bei der Entwicklung neuer wirksamer Verbindungen, die Struktur-Wirkungsbeziehungen, das Problem der Agonisten-Antagonisten u. a. im einzelnen eingegangen wird.

Es folgen 4 Kapitel über die Benutzung physiko-chemischer Parameter zur Ermittlung quantitativer Struktur-Wirkungsbeziehungen, wie z. B. Verteilungskoeffizienten, pK -Werte, Molekular-Orbital-Berechnungen, Charge Transfer, u. a.

Die letzten beiden Kapitel tragen der Tatsache Rechnung, daß chemische Äquivalenz nicht gleichbedeutend mit biologischer Äquivalenz sein muß, und behandeln Grundlagen der Biopharmazie und Pharmakokinetik, sowie ihre Bedeutung für die Entwicklung neuer Präparate.

Das Buch enthält zahlreiche Formeln, Abbildungen und Tabellen und kann – obwohl Drug Design sich noch in seinem ersten Entwicklungsstadium befindet – vielen Wissenschaftlern, die sich mit der Entwicklung neuer biologisch aktiver Substanzen befassen, als Quelle wertvoller Anregungen dienen.

G. LUDWIG, Konstanz.

NMR-Spektroskopie. Von V. H. GÜNTHER, Georg-Thieme-Verlag, Stuttgart 1973, 423 S. m. 186 Abb.; Preis DM 19,80.

Das vorliegende Buch vermittelt eine systematische Einführung in die physikalischen Vorgänge der magnetischen Kernresonanz, die chemische Verschiebung und die Spin-Spin-Kopplung der Protonen sowie die Korrelation von Verschiebungen und Kopplungskonstanten mit Strukturmerkmalen organischer Verbindungen. Ein Kapitel ist der Berechnung von Spinsystemen mit Hilfe quanten-

mechanischer Konzepte sowie der Bestimmung chemischer Verschiebungen und Kopplungskonstanten aus experimentellen Protonen-NMR-Spektren gewidmet. In weiteren Abschnitten werden die Einflüsse von Molekülsymmetrie und Chiralität, Protonenaustausch und Rotationen, Inversionen und Valenztautomerie organischer Moleküle auf die Protonen-NMR-Spektren besprochen. Auch die Bedeutung von Fluor-19 und Kohlenstoff-13 als NMR-Meßsonden wird kurz umrissen. Zwei Abschnitte widmen sich der Technik und Praxis der NMR-Spektroskopie. Dabei werden auch Anwendungsmöglichkeiten von Doppelresonanzexperimenten, chemisch induzierter dynamischer Kernpolarisation, paramagnetischen Verschiebungsreagentien und flüssigen Kristallen als Lösungsmittel skizziert. Im Anhang sind chemische Protonen-Verschiebungen und HH-Kopplungskonstanten wichtiger Strukturtypen übersichtlich tabelliert. Nützlich dürften auch die Tabelle der Linienfrequenzen und Intensitäten eines AB_2 -Systems in Abhängigkeit vom Verhältnis Kopplungskonstante: Verschiebungsdifferenz sowie ein Abschnitt zur Modifikation der Bloch'schen Gleichungen für den chemischen Austausch und FORTRAN-Programmlisten zur Linienformberechnung sein. Vierzig Übungsaufgaben (im Text) mit Lösungen (am Schluß) dienen dem Leser zur Überprüfung seiner bei der Lektüre erworbenen Kenntnisse.

Das Buch ist im wesentlichen klar und stichhaltig geschrieben, hat jedoch keineswegs nur Lehrbuchcharakter, sondern erreicht recht häufig Monographieniveau. Es wird daher dem Chemiker in Studium und Beruf eine nach Qualität und Umfang vorzügliche Einführung, dem NMR-Spektroskopiker aber auch ein komprimiertes Nachschlagewerk sein. Diese Eigenschaften sowie der günstige Anschaffungspreis machen das Buch einem verhältnismäßig großen Leserkreis zugänglich, zumal es gegenwärtig auch keine echte Alternative in der deutschsprachigen NMR-Literatur gibt.

E. BREITMAIER, Tübingen.