

der Organischen Synthesechemie. Die Autoren stellen Zeolithe als Katalysatoren für Isomerisierungen, Umlagerungen, Alkylierungen, Acylierungen etc. vor. Während in diesem Kapitel also das Entwicklungspotential der Katalyse an Zeolithen beleuchtet wird, geben im 15. Kapitel I. E. Maxwell und H. H. J. Stork einen Überblick über die modernen, großtechnisch realisierten Prozesse der sekundären Erdöl- und Erdgasverarbeitung wie das katalytische Cracken, die Umsetzung von Synthesegas zu Benzinkomponenten, die von Methanol zu Benzinkomponenten (MTG) und zu Olefinen (MTO) und die Umsetzung von leichten Paraffinen zu Arenen (CYCLAR-Prozeß). Limitierend beim Einsatz von (Zeolith-)Katalysatoren kann die Koksbildung sein, mit der sich H. G. Karge in Kapitel 14 auseinandersetzt. Unter anderem werden die Rolle der sauren Zentren und die Lokalisierung der Kokabscheidung (innerhalb des zeolithischen Poresystems oder an der äußeren Kristalltoberfläche) diskutiert. Gegenstand des 13. Kapitels (H. W. Kouwenhoven, B. de Kroes) ist die Präparation von Zeolithkatalysatoren. Im Mittelpunkt dieses Kapitels steht die Herstellung von Katalysatoren für das Fluidized-Catalytic-Cracking(FFC)-Verfahren, den wichtigsten Prozeß für die Herstellung von Benzinkomponenten aus höhersiedenden Einsatzprodukten. Viele Reaktionen bei der Kohlenwasserstoff-Umwandlung sind sauer katalysiert. Eine Einführung in die saure Katalyse an Zeolithen bei diesen Reaktionen geben P. A. Jacobs und J. A. Martens in Kapitel 12. Der Abschnitt über die formselektive Katalyse an sauren Zeolithen, einen der wichtigsten Einsatzbereiche der Zeolithkatalysatoren, ist besonders hervorzuheben. Bei (formselektiven) katalytischen Reaktionen und selektiven Adsorptions/Separationsprozessen ist die Diffusion eine entscheidende Einflußgröße, mit der sich M. F. M. Post in Kapitel 11 befaßt. Der Ionenaustausch in Zeolithen ist Gegenstand des 10. Kapitels von R. P. Townsend. Ionenaustauscheigenschaften sind die Grundlage für die Verwendung von Zeolith NaA als Phosphatersatz in Waschmitteln. Eine Einführung in Theorie und Modellierung der Zeolithe geben R. A. van Santen, D. P. de Bruyn, C. J. J. den Ouden und B. Smit in Kapitel 9. Diskutiert werden die Theorien zur Gitterstabilität von Zeolithen, zu Adsorption und Acidität, die Zeolith-Modellierung auf dem Computer und die Simulation von Adsorption und Diffusion. Die Charakterisierung von Zeolithen ist Thema der Kapitel 7 und 8. J. H. C. von Hoff und J. W. Roelefsen diskutieren in Kapitel 7 die Methoden zur Bestimmung von Struktur und Strukturdefekten, der Porengröße, der chemischen Zusammensetzung, der Zeolithacidität, der Morphologie und der Partikelgröße. In Kapitel 8 stellt G. Engelhardt die Anwendung der Festkörper-NMR-Spektroskopie für die Untersuchung von Zeolithen vor. Die Möglichkeiten der ^{29}Si - und der ^{27}Al -MAS-NMR-Spektroskopie (MAS = Magic Angle Spinning) sowie die wichtige Frage der Bestimmung der Anteile an Framework-, Non-Framework-Al und „NMR-unsichtbarem Al“ werden diskutiert. ^{17}O -, ^{11}B -, ^1H -, ^{13}C - und ^{31}P -MAS-NMR-Spektroskopie sind auch auf nicht-zeolithische Molekularsiebe anwendbar.

Der Synthese von Molekularsieben sind die Kapitel 4–6 gewidmet. In Kapitel 4 geben J. O. Jansen und S. T. Wilson einen Überblick über die Synthese von Zeolithen bzw. über die von Molekularsieben auf Basis von AlPO_4 . Die Angaben zur Synthese von relativ großen Einkristallen für einige Zeolithe werden sicher auf besonderes Interesse stoßen. Unter der Überschrift „Modified Zeolites“ beschäftigt sich R. Szostak in Kapitel 5 mit sekundären und post-synthetischen Behandlungen wie der Al-Extraktion aus dem Zeolithframework mit verschiedenen Methoden. Den Übergang von den zweidimensionalen Tonmineralien zu dreidimensionalen Strukturen, den Pillared Clays, diskutiert R. A. Schoon-

heydt in Kapitel 6. Pillared Clays zeigen Molekularsiebeigenschaften. Der Durchmesser der Kanäle ist größer als in Zeolithen, so daß hier auch Moleküle mit größeren kritischen Durchmessern noch im Hohlraumsystem umgesetzt werden können.

An den Anfang des Buches haben die Herausgeber die Besonderheiten der Zeolithe (uniformes Poresystem, für Reaktanten zugängliche innere Oberfläche, Ionenaustauschfähigkeit, die Möglichkeit, Größe der Porenöffnungen und Acidität maßzuschneidern) gestellt. Diese Besonderheiten legt L. Moscou in Kapitel 1 übersichtlich dar, was dem Einsteiger die Einarbeitung in die Thematik erleichtert. Im zweiten Kapitel gibt E. M. Flanigen einen historischen Abriß zu Synthese und Anwendung der Zeolithe. H. van Koningsveld befaßt sich in Kapitel 3 mit der Beschreibung von Zeolithstrukturen. Im Anhang I sind die strukturellen Charakteristika einiger wichtiger Molekularsiebe zusammengestellt, Anhang II enthält Angaben zu den Porengrößen und strukturell isotypen Spezies. Beides ist besonders für den Einsteiger hilfreich. Das ausführliche Sachregister ermöglicht den schnellen, gezielten Zugriff auf das gesuchte Detail.

Die einzelnen Beiträge bringen nach Darlegung der Grundlagen die neuesten Ergebnisse und verweisen auf die aktuelle Literatur bis 1989. Die übersichtliche Gestaltung trägt zur guten Lesbarkeit bei. Wünschenswert wäre jedoch die durchgängige Benutzung der Genfer Nomenklatur für die Gliederung. Das vorliegende Buch ist sowohl für Einsteiger als auch für Fachleute sehr wertvoll und kann jedem auf diesem Gebiet Interessierten empfohlen werden.

Michael Nimz

Institut für Anorganische und Analytische Chemie
der Technischen Universität Berlin

Wood and Cellulosic Chemistry. Herausgegeben von D. N.-S. Hon und N. Shiraishi. Marcel Dekker, New York, 1991. VIII, 1020 S., geb. \$ 234. – ISBN 0-8247-8304-3

Unter den nachwachsenden Rohstoffen und Energieträgern kommt dem Holz eine herausragende Rolle zu. Die Holzbildung in den Bäumen des Waldes trägt wesentlich zur Abnahme des Kohlendioxidgehalts in der Atmosphäre bei. Das aus Verbrennungs- und Veratmungsprozessen von fossilen und rezenten Kohlenstoffquellen entstandene Kohlendioxid kann wieder in Form von organischen Kohlenstoffverbindungen über längere Zeit akkumuliert werden. Allein hieraus wird die aktuelle Bedeutung der Holzchemie und der chemischen Holznutzung deutlich.

Die holzchemische Forschung reicht heute in zahlreiche Fachdisziplinen hinein, und die Ergebnisse sind oft breit gestreut, so daß Zusammenfassungen unter ordnenden Gesichtspunkten von großem Wert sind. Dieses Ziel wird mit dem vorliegenden Werk weitgehend erreicht.

Das Fachbuch, das von 18 japanischen und 4 US-amerikanischen Wissenschaftlern, anerkannten Spezialisten auf den jeweiligen Fachgebieten, verfaßt wurde, ist in 3 Hauptteile gegliedert, die wiederum in insgesamt 21 Kapitel unterteilt sind. In Teil 1 („Struktur und Chemie“) werden ausgehend von der Struktur und Bildung der verholzten pflanzlichen Zellwand die chemischen Eigenschaften der Komponenten des natürlichen Polymerverbundes Holz – Cellulose, Hemicellulose, Lignin, Holzinhaltstoffe – im einzelnen beschrieben. In besonderen Kapiteln werden die Chemie der Rinde und die chemische Charakterisierung des Holzes und seiner Komponenten vorgestellt. Dieser Teil hätte noch gewonnen, wenn die Biochemie der Holzbildung in einem besonderen Kapitel behandelt worden wäre.

Teil 2 („Abbau“) enthält einige Kapitel, die in dieser Form in einer Monographie noch nicht publiziert wurden, z.B. „Färbung und Verfärbung“ und „Photochemie des Holzes“. Ausführlich und instruktiv wird über den chemischen, mikrobiologischen, enzymatischen und pyrolytischen Abbau des Holzes berichtet. In diesem Teil hätte man auch Abhandlungen über die Vergasung und Verflüssigung des Holzes erwartet, die aber leider fehlen.

Teil 3 („Modifikation und Nutzung“) geht auf die chemischen Grundlagen einer breiteren Verwertung von Holz und Cellulose durch Wandlung der Eigenschaften dieser natürlichen Roh- und Werkstoffe ein. Dabei stehen die chemische Modifikation von Holz und Cellulose, die Holzplastifizierung, die Holz-Polymer-Verbunde und die Klebstoffe für das Holz im Vordergrund. In einem leider etwas kurz gefassten Abschnitt wird die Nutzung des Holzes und der Cellulose für Chemikalien und Energie beschrieben.

Insgesamt gesehen bietet das Werk eine sehr gute, aktuelle und zum Teil detaillierte Übersicht über das Spezialgebiet der Holz- und Cellulosechemie, wobei auf Grund der Vielzahl der Autoren Überschneidungen nicht vermeidbar waren. Besonders hervorzuheben sind die zahlreichen Literaturzitate am Ende eines jeden Kapitels, in denen Hinweise auf Veröffentlichungen aus Japan sehr stark dominieren. Das Buch kann einem Leserkreis aus Forschung und Lehre empfohlen werden, der sich aktuell über den Stand der Erkenntnisse auf den Gebieten der Chemie der nachwachsenden Rohstoffe, der natürlichen Polymere sowie der Holz- und Cellulosechemie informieren will.

Otto Wienhaus
Institut für Pflanzenchemie
und Holzchemie
der Technischen Universität Dresden
Abteilung Forstwirtschaft Tharandt

Maximum Entropy in Action. Herausgegeben von *B. Buck* und *V. A. Macaulay*. Clarendon Press, Oxford, 1991. XXVII, 220 S., geb. £ 15.00. – ISBN 0-19-853963-0

Die Maximierung der Entropie (MEM) als grundlegendes Prinzip für so unterschiedliche Wissenschaftsbereiche wie Bildverarbeitung, Spektrenprozessierung, direkte Methoden der Röntgenstrukturanalyse und statistische Thermodynamik wird im vorliegenden Buch vorgestellt und propagiert. Angesichts der Polarisierung der Wissenschaftler in enthusiastische MEM-Verfechter und Skeptiker ist dieses Buch hochwillkommen. Es entstand aus einer Reihe von Vorlesungen, die von ausgewiesenen Experten im Department of Physics an der Oxford University im Sommer 1989 gehalten wurden. Sie sind in Stil und Inhalt fast unverändert übernommen worden. Dies führt zu einer gewissen Heterogenität der Beiträge und zu einigen Wiederholungen in den Einleitungen, sichert aber auch die Aktualität des Buches.

Das Buch ist in acht Kapitel aufgeteilt, denen eine Einleitung der Herausgeber vorangestellt ist. Die Einleitung bietet einen kurzen Überblick über die informationstheoretisch formulierte Entropie (Shannon, 1948) und ihre Beziehungen zu Bayes' Wahrscheinlichkeitsrechnung (Jaynes, 1959). Auf mathematische Formeln wird hier fast vollständig verzichtet, so daß das Niveau für einen breit interessierten Naturwissenschaftler angemessen ist.

Im ersten Beitrag (G. J. Daniell: „Off maps and monkeys“) wird die Rekonstruktion von Verteilungen (Maps) aus unvollständigen oder gestörten Messungen gezeigt, die z. B. eindimensionale NMR-Spektren, eine aus Röntgenstreudaten gewonnene Dichteverteilung oder auch Bilder

(Images) von Neutronenverteilungen in einem Tokamak sein können. Bayes' Wahrscheinlichkeitstheorie und das Prinzip der Maximierung der Shannon-Entropie werden benutzt, um die wahrscheinlichste Verteilung zu finden, die mit den unvollständigen Meßdaten im Einklang steht. Eindrucksvoll wird neben der konzeptionellen auch die praktische Überlegenheit von MEM gegenüber Fourier-Transformation (FT) am Beispiel eines vorzeitig abgebrochenen (truncated) Free Induction Decay (FID) gezeigt, obwohl leider, zu Vergleichszwecken anfechtbar, nur eine normale FT (ohne Apodisierung, aber mit Zerofilling) eingesetzt wurde.

Das zweite Kapitel (J. Skilling) beschäftigt sich mit zweidimensionaler Bildanalyse. Eine mathematisch abstrakte Formulierung von Bayes' Wahrscheinlichkeitstheorie wird für die Berechnung der Wahrscheinlichkeit eines Bildes, das mit unvollständigen Meßdaten (in diesem Fall dem γ -Strahlenbild einer Schilddrüse) in Einklang zu bringen ist, verwendet. Zusätzlich wird die Einbeziehung von Vorwissen (Vorurteilen) über das Bild beschrieben, im Fall der Schilddrüse, daß die Kontraste (Konzentrationsänderungen des γ -Strahlers) nicht zu groß sein dürfen. Diese angenommene Verschmierung (Preblur) führt in der Tat zu einem besseren Bild. Leider wird in diesem Beispiel auf einen Vergleich mit ähnlich optimierten Fourier-Methoden verzichtet – nicht überraschend, denn in den einleitenden Worten dieses Aufsatzes findet man: „However, MEM is not just a good technique for data analysis from imperfect data, it is the technique.“

Der dritte Beitrag (P. Hore) beschäftigt sich mit ein- und zweidimensionalen NMR-Experimenten. Den messianischen Stil der zwei vorhergehenden Kapitel vermisst man nicht, und man findet hier eine sachliche Auseinandersetzung mit Fragen wie Auflösungssteigerung, Signal-zu-Rauschen-Steigerung, vorzeitigem Abbrechen (Truncation) des FID. Es schließen sich Beispiele an, in denen vorher bekannte Verzerrungen des Spektrums (Gemischte Phasen in der 2D-J-NMR-Spektroskopie und Offset-Effekte im Rotating Frame Imaging) beseitigt werden. Schließlich findet man NMR-spezifische Erweiterungen des Algorithmus, so daß auch negative Signale im Spektrum zugelassen werden.

Das vierte Kapitel (S. Davis et al.) ist mit dem dritten eng verwandt. Es enthält Beispiele zur Analyse von NMR-Spektren mit wenigen breiten Signalen (Polymere). Raman-Spektren sowie Magic-Angle-Sample-Spinning(MAS)-Spektren schließen sich an. Interessant ist zu sehen, wie Vorinformationen über das zu erhaltende Spektrum (etwa die theoretisch voraussagbare Verteilung von Rotationsseitenbanden in einem MAS-Spektrum) in den MEM-Algorithmus eingehen. Von eher akademischem Interesse ist das Beispiel, in dem eine ad hoc definierte, etwas modifizierte Shannon-Entropie zu unsinnigen Spektrenrekonstruktionen führt.

Das fünfte Kapitel (G. A. Cottrell) zeigt einige weitere Anwendungen in der Rekonstruktion von ein- und zweidimensionalen Verteilungen an Beispielen aus der Hochenergiephysik. Hier wird eindrucksvoll demonstriert, wie man die Dichteverteilung von Neutronen in einer Röhre aus nur 12 zentrierten Projektionen (klassisch mit „Projection-Reconstruction“-Methoden) erhalten kann. Wichtig war in diesem Beispiel, eine hohe Auflösung des wegen der Meßtechnik intrinsisch schlecht aufgelösten Bildrandes zu erhalten, da die am Bildrand erscheinenden Neutronen zu einer Beschädigung der umhüllenden Röhre führen würden.

Das sechste (A. J. M. Garrett) und das siebte Kapitel (S. F. Gull) beschäftigen sich mit zwei zur Theoretischen Physikalischen Chemie gehörenden grundlegenden Themen: „Macroirreversibility and Microreversibility reconciled“ und „Some misconceptions about entropy“. Die Behandlung eindimensionaler Brownscher Bewegung am Ende des siebten Kapitels weitet die Thematik zur Nichtgleichgewichtsthermodynamik aus.