

tiert wird; dies stimmt nicht mit der in Chemical Abstracts üblichen Zitierweise überein.

Diese Mängel, besonders die fehlenden Kapitel, schränken den Gebrauchswert dieses Werkes etwas ein, besonders wenn man dabei den recht allgemein gehaltenen Titel des Buches vor Augen hat, der impliziert, daß die analytische SFC und SFE vereinheitlichend diskutiert werden. Trotz dieser Einschränkungen liefert das Buch immer noch eine Fülle nützlicher Informationen; die Kapitel sind gut geschrieben und geben gute Zusammenfassungen zum jeweiligen Thema. Jeder, der sich für SFC und SFE interessiert, wird mit Gewinn darin blättern.

Leslie S. Ettre

Department of Chemical Engineering  
Yale University  
New Haven, CT (USA)

### The Organic Chemistry of $\beta$ -Lactams.

Herausgegeben von G. I. Georg. VCH Verlagsgesellschaft, Weinheim/VCH Publishers, New York, 1993. XI, 381 S., geb. 189.00 DM. – ISBN 3-527-28188-6/1-56081-083-1

Auch 65 Jahre nach Flemings bahnbrechender Entdeckung von Penicillin steht die Chemie des „Zauberrings“ (J. C. Sheehan) noch in voller Blüte. Entsprechend schwierig ist es, den Überblick über alle aktuellen Entwicklungen der  $\beta$ -Lactam-Chemie zu behalten. Hier will das vorliegende Werk mit einer Zusammenfassung der wichtigsten Ergebnisse der achtziger Jahre mit punktuellen Hinweisen bis 1991 helfen. Dabei werden nicht wie in ähnlichen Werken einzelne Typen von Antibiotica nacheinander abgehandelt, sondern die allgemein wichtigen Methoden herausgearbeitet.

Konkret geht es im ersten Kapitel um „Protective Groups in  $\beta$ -Lactam Chemistry“ (H. Wild, 48 Seiten) mit einer durch viele Tabellen unterstützten Zusammenstellung der speziellen Schutzgruppentechnik. Wie sehr die oft ausgeprägte Labilität des Vierrings zwingt, Reaktionen und Methoden an die speziellen Gegebenheiten zu adaptieren, zeigt das Kapitel „Introduction and Transformation of Functional Groups in  $\beta$ -Lactam Chemistry“ (H. Wild, 71 Seiten). In „Strategies for the Synthesis of Bicyclic  $\beta$ -Lactams (J. Kant und D. G. Walker, 76 Seiten) geht es um Strategien zur Anellierung eines weiteren Ringes an das vorgegebene  $\beta$ -Lactam-System. Über den üblichen Antibiotica-Horizont hinaus weist das Kapitel „ $\beta$ -Lactam Synthon Method: Enantiome-

rically Pure  $\beta$ -Lactams as Synthetic Intermediates“ (I. Ojima, 59 Seiten), in dem die Verwendung von  $\beta$ -Lactamen als Zwischenprodukte für die Herstellung besonders von optisch aktiven Aminosäuren und von Oligopeptiden beschrieben wird.  $\beta$ -Lactam-Ringschlußreaktionen werden im Kapitel „Novel Methods for the Construction of the  $\beta$ -Lactam-Ring“ von R. J. Ternansky und J. M. Morin jr. zusammengefaßt (37 Seiten), wobei der Informationsgehalt allerdings deutlich hinter dem anderer Abhandlungen über  $\beta$ -Lactam-Antibiotica zurückbleibt. Abschließend erörtern die Herausgeberin und V. T. Ravikumar die  $\beta$ -Lactam-Synthese durch „Stereocontrolled Ketene-Imine Cycloaddition Reactions“ (74 Seiten). Nicht behandelt werden in dem Buch die  $\beta$ -Lactam-Synthesen durch Ester-Enolat/Imin-Cyclokondensation und über die Reaktion von Iminen mit Carbenkomplexen.

Die Kapitel sind ausführlich mit Literaturziten unterlegt und wirken sorgfältig redigiert; ein Fehler ist in der Formulierung von Danes Salz (S. 346) durchgerutscht. Die Formelzeichnungen wurden offenbar jeweils von den Autoren selbst erstellt und sehen so von Kapitel zu Kapitel unterschiedlich aus, was dem sehr guten optischen Eindruck des Buches jedoch keinen Abbruch tut. Insgesamt liegt ein Werk vor, das für den  $\beta$ -Lactam-Chemiker viel Interessantes und Nützliches enthält und das so jedem auf dem Gebiet Tätigen wärmstens empfohlen werden kann.

Jens Nieschalk, Ernst Schaumann

Institut für Organische Chemie  
der Technischen Universität Clausthal

**Theoretical Treatment of Liquids and Liquid Mixtures.** (Reihe: Studies in Physical and Theoretical Chemistry, Vol. 80.) Von C. Hoheisel. Elsevier, Amsterdam, 1992. XVI, 362 S., geb. 320.00 hfl, 200.00 \$. – ISBN 0-444-89835-2

Die vorliegende Monographie wendet sich an Wissenschaftler und Studenten mit guten Kenntnissen in Statistischer Mechanik. Sie will theoretische Konzepte zur Beschreibung flüssiger Mischungen besonders betonen. Die Einführung in die Statistische Mechanik ist daher äußerst knapp gehalten: Hier werden ausschließlich die Grundbeziehungen der thermodynamischen Potentiale zu den Größen des kanonischen Ensembles behandelt. Der Autor fährt dann mit allgemeinen Bemerkungen zu Computersimulationen fort. Die beiden nächsten Kapitel enthalten

eine Darstellung der Monte-Carlo(MC)- und der Molecular-Dynamics(MD)-Simulationsmethode. Hier sind grundlegende Beziehungen zu den Eigenschaften von Markov-Ketten und zu Simulationsprinzipien dargestellt. Ausführungen über zwischenmolekulare Wechselwirkungspotentiale werden vermischt mit Beschreibungen der MD-Methode und Absätzen zu Simulationstechniken. Schon jetzt entsteht der Eindruck, daß der eigentliche Inhalt des Buches der Darstellung von Simulationsergebnissen gewidmet ist.

Hat man die ersten vier Kapitel, sie sind vom Umfang her offenbar als Einführung gedacht, durchgesehen, so muß man leider feststellen, daß die Art der Darstellung weit hinter der anderer Monographien zurückbleibt. Eine didaktisch saubere und für den Leser nachvollziehbare Darstellung sollte sich an Büchern wie K. Lucas' „Angewandte Statistische Thermodynamik“ oder D. Chandlers „Introduction to Modern Statistical Mechanics“ orientieren. Sucht man eine systematische Einführung in Simulationen von fluiden Systemen, so ist man mit Allens und Tildesleys „Computersimulation of Liquids“ besser beraten.

Kapitel 5 umfaßt alle Gleichgewichtseigenschaften sowie Struktur und Thermodynamik von fluiden Systemen. Hier werden die Widersprüche zwischen dem im Vorwort formulierten Anliegen und dem aktuellen Inhalt des Buches sehr deutlich: Die Ausführungen zu Integralgleichungstheorien sind knapp und beschreiben einen Wissensstand, der mehr als zehn Jahre zurückliegt. In den ausführlichen Erläuterungen zu Hartkugelsystemen werden Simulationen mit Percus-Yevick- und Hypernetted-Chain-Rechnungen verglichen. Gleiches wiederholt sich bei den Lennard-Jones-Systemen. Der Schwerpunkt liegt dabei auf der Diskussion von additiven und nichtadditiven Mischungen. Weiterentwicklungen wie den Einsatz von Integralgleichungen bei inhomogenen Systemen, schnelle Lösungsverfahren für die Ornstein-Zernike-Gleichung oder LHNC- und RHNC-Ansätze hat der Autor nicht zur Kenntnis genommen. Abbildungen wie A33 vermitteln daher ein veraltetes Bild von den Möglichkeiten theoretischer Ansätze. Auch der Hinweis „The reader is referred to the existing relevant literature“ (z.B. S. 115) kann nicht trösten. Viel gravierender allerdings ist die Tatsache, daß der Autor über polare Systeme überhaupt nicht spricht und den Molecular Liquids ganze fünf Seiten widmet. Ergebnisse moderner Entwicklungen, auch auf dem Gebiet der Simulationen, werden hier unterdrückt und nur wenige eigene Arbeiten zitiert.

Insgesamt ist die Literatursammlung und -behandlung kritikwürdig. Literaturzusammenstellungen erscheinen in die Kapitel eingestreut. Es fehlt jedoch nahezu jeder Verweis im Text, so daß es dem Leser überlassen bleibt herauszufinden, welches Zitat wohl an welcher Stelle gemeint sei. Das Fazit nach dem Lesen des Teils A lautet, daß der Inhalt dem Titel des Buches nicht gerecht wird.

Auf den ersten Blick scheint die Verbindung von Gleichgewichtseigenschaften und Dynamik in flüssigen Systemen sehr vielversprechend, zumal die theoretischen Konzepte sich überlagern. Es ist allerdings auch ein sehr anspruchsvolles Unterfangen, beide Gebiete in der Breite behandeln zu wollen. Teil B des Buches bildet mit 200 Seiten den Schwerpunkt von Umfang und Inhalt her. Wieder stehen die Simulationen und ihre Auswertung im Mittelpunkt. Beim genauen Hinsehen fallen jedoch Lücken und Unzulänglichkeiten in der theoretischen Darstellung und Systematik auf. Unglücklicherweise wird die Theorie nur so lange verfolgt, wie sie zur Interpretation der Simulationen benötigt wird. Verweise auf eine genauere Darstellung in späteren Kapiteln häufen sich (z.B. S. 165, 182, 183, 185, 187, 188, 192, 244) und lassen auf eine fehlende Systematik schließen.

Nach einer Einführung mit Bilanzgleichungen und einfachen Beispielen zur Navier-Stokes-Gleichung folgt ein Kapitel zu Zeitkorrelationsfunktionen, das viele Dinge nur anreißt. Bei der Beschreibung der Selbstdiffusion werden aus umfangreichen Simulationen an Lennard-Jones-Systemen Autokorrelationsfunktionen erhalten und Diffusionskoeffizienten bestimmt. Diese Daten sind mit Ergebnissen der Enskog- und der Kinetic Mean Field Theory verglichen. Die Resultate werden aber nicht anhand experimenteller Größen bewertet (Ausnahme: Tab. B3). Die letzten Gleichungen in (9.3.1.1.10) scheinen Setzfehler zu enthalten. Das nächste Kapitel ist den Transportkoeffizienten gewidmet. Ausgehend von den Green-Kubo-Gleichungen werden aus Simulationen an Lennard-Jones-Mischungen Diffusionskoeffizienten, Viskositäten und Wärmeleitfähigkeiten abgeleitet. Hier zieht der Autor systematisch Vergleiche mit der Enskog- und der kinetischen Theorie, der Rice-Allnatt-Näherung und dem Gaussian Memory Function Model und diskutiert die Resultate. Das Buch schließt mit Ausführungen zu Nichtgleichgewichtssimulationen und Auswertungen von Transportkoeffizienten. An dieser Stelle finden sich erstmals Vergleiche mit Experimentaldaten, die eine Bewertung der Simulationen ermöglichen.

Nimmt man in diesem Buch die zahlreichen Hinweise auf weiterführende Monographien und Originalliteratur ernst, muß man zu dem Schluß kommen, es sei besser, gleich in diesen Büchern nachzulesen.

Jochen Winkelmann

Institut für Physikalische Chemie  
der Universität Halle-Wittenberg

**Chemie und Geisteswissenschaften. Versuch einer Annäherung.** Herausgegeben von J. Mittelstraß und G. Stock. Akademie-Verlag, Berlin, 1992. 340 S., geb. 48.00 DM. – ISBN 3-05-501604-1

Der hier vorliegende Band gibt die Vorträge der ersten Tagung des Programms „Chemie und Geisteswissenschaften“ wieder, die im November 1991 stattfand. Dieses vom Stifterverband für die Deutsche Wissenschaft betreute und vom Fonds der Chemischen Industrie unterstützte Programm soll die geisteswissenschaftliche Auseinandersetzung mit der Chemie anregen und fördern.

Was verbindet Chemie und Geisteswissenschaften? Existiert hier nicht, wie Weyma Lübke in ihrem Beitrag zu diesem Band anmerkt, eine vernünftige Abgrenzung von Disziplinen? Sollte man nicht, wenn man schon den interdisziplinären Kontakt sucht, „Natur- und Geisteswissenschaften“ sagen? Jürgen Mittelstraß gibt in der Einleitung die Antwort: Er sieht einen wissenschaftshistorischen und einen wissenschaftspolitischen Grund für die Notwendigkeit einer Annäherung gerade der Chemie an die Geisteswissenschaften. Der historische Grund liegt in der Sonderentwicklung der Chemie innerhalb der Naturwissenschaften, ihrer Philosophieferne, die sie von der Physik und der Biologie unterscheidet. Mittelstraß wünscht sich nun eine Änderung dieses Zustandes durch die Begegnung der Chemie mit einer wissenschaftstheoretisch orientierten Philosophie. Diese Begegnung könnte die Chemie von der „Baconschen Insel“ der Empirie auf das „Newtonsche Festland“ der Theorie führen. Den wissenschaftspolitischen Grund sieht Mittelstraß in der immer aktuellen Umweltdebatte, die die Chemie zwingt, sich ihren Auswirkungen zu stellen und den Meinungen, die darüber in der Öffentlichkeit vertreten werden.

Der Band ist in vier Teile gegliedert. Nach einem chemiehistorischen Teil mit Aufsätzen von Brian Vickers zur Alchemie als verbaler Kunst und von Martin Carrier über Cavendishs Version der Phlogistontheorie folgen die beiden Kernstücke des Sammelbandes: Der hauptsächlich

von Naturwissenschaftlern bestrittene zweite Teil ist eine Darstellung der Chemie in der modernen Welt. Gerhard Quinkerts Beitrag (Spuren der Chemie im Weltbild unserer Zeit) schildert vor allem die Rolle der chemischen Synthese als „Hauptquelle chemischer Erkenntnis“. Hans-Jürgen Quadbeck-Seeger (Chemie und die Entwicklung der Lebensbedingungen) betont den Stellenwert der Produkte der chemischen Industrie bei der Sicherung unserer Lebensbedingungen. Klaus Mainzcr (Chemie, Computer und moderne Welt) schreibt über die Auswirkungen der Computertechnologie, vor allem der Künstlichen Intelligenz, auf die Chemie und die Wissenschaftstheorie der Chemie. Hubert Markls Artikel (Die Natürlichkeit der Chemie) betont die Einheit von Natur und Chemie.

Der wissenschaftstheoretisch ausgerichtete dritte Teil beginnt mit einem Aufsatz von Peter Janich (Chemie als Kulturleistung). Hier und in dem nächsten Beitrag von Weyma Lübke (Die „chemische Grundlage“ der Kulturwissenschaften) wird das generelle Problem des Dialogs zwischen Natur- und Geisteswissenschaften deutlich: Geben jene einer naturalistischen Betrachtungsweise der gesamten Wirklichkeit, also der Natur und der Kultur, den Vorzug, so neigen diese zu einem kulturalistischen Ansatz für das Verständnis beider Bereiche. Auch die beiden diesen Teil beschließenden Aufsätze von Reinhard Löw (Kann die Chemie das Leben erklären?) und von Hermann Lübke (Erfahrungsverluste, Lebensvorzüge und Lebensweltferne der Chemie) beschäftigen sich im weiteren Sinne mit dieser Problematik.

Den vierten und letzten Teil bildet eine von Sabrina Dittus und Matthias Mayer zusammengestellte Bibliographie, die stark chemiegeschichtlich orientiert und über 100 Seiten stark ist. Sie kann auch dem einschlägig interessierten Leser noch Neues bieten und ist fundiert erarbeitet, allerdings schwierig zu benutzen, da man auf der Suche nach bestimmten Themen doch immer wieder die gesamte Bibliographie durchsehen muß.

Generell liegt eine gelungene Bestandsaufnahme der Spurensuche nach Verbindendem zwischen Chemie und Geisteswissenschaften vor. Der Dialog wird fortgesetzt; im September 1993 fand eine weitere Tagung statt, betitelt „Selbstbilder und Fremdbilder der Chemie“. Als Aufnahme, als Bild der jeweils anderen Seite, ist dem Buch „Chemie und Geisteswissenschaften“ eine zahlreiche Leserschaft in beiden Kulturen zu wünschen.

Carsten Reinhardt  
Remseck