

gelingen. Bedauerlich ist auch, daß Wagnière nicht angibt, wie aus graphischen Darstellungen Gleichungen abgeleitet werden können – Analogien haben ihre Grenze. Von wenigen Ausnahmen abgesehen ist dem Autor jedoch ein ausgewogenes Verhältnis zwischen dem im Grundlagentext und in den Anhängen dargestellten Stoff gelungen.

Der Leser sollte sich auch darüber im klaren sein, wovon dieses Buch *nicht* handelt. Es geht weder um spezielle Moleküle noch um Anwendungen, sondern um *Phänomene*. Im großen und ganzen tauchen Moleküle im Buch nur über ihre Symmetrieeigenschaften auf, und Anwendungsbeispiele dienen ausschließlich zur Veranschaulichung. Über die praktische Anwendung von Molekülen in der nichtlinearen Optik kann sich der Leser in „Nonlinear Optical Properties of Molecules and Crystals“ von Zyss und Chemla, in „Introduction to Nonlinear Optical Effects in Molecules and Polymers“ von Prasad und Williams oder in den zahlreichen Übersichtsartikeln zu diesem Thema informieren – aber lesen Sie Wagnières Buch zuerst! Ebenso ist „Introduction to Nonlinear Laser Spectroscopy“ von Levinson und Kano eine empfehlenswerte Lektüre für Molekülspektroskopiker.

„Linear and Nonlinear Optical Properties of Molecules“ ist vergleichsweise preiswert und sollte bei jedem im Bücherregal stehen, der auf dem Gebiet der nichtlinearen Optik oder der Molekülspektroskopie von kondensierten Phasen arbeitet. Für Studenten ist das Buch als erste Orientierung über das Thema vielleicht weniger geeignet; wenn es später jedoch gilt, sich eine Systematik zur Erklärung und zum Verständnis optischer Effekte in Molekülen zu verschaffen, ist es von unschätzbarem Wert. Die Anhänge enthalten eine Fülle wertvoller Formeln und Beziehungen und werden sogar dem in der linearen Optik erfahrenen Praktiker von Nutzen sein.

Colin Bain
Physical Chemistry Laboratory
Oxford University
Oxford (Großbritannien)

Three-Dimensional Chemical Similarity Searching. (Reihe: Research Studies Press.) Von C. Pepperrell. Wiley, Chichester, 1994. 304 S., geb. 57.50 £. – ISBN 0-86380-145-5

Seit mehr als einem Jahrhundert verwenden Chemiker zweidimensionale Strukturformeln, um chemische Informationen festzuhalten. Diese Darstellungsart

war bisher auch für die computergestützte Speicherung, Bearbeitung und Abfrage von Strukturdaten die wichtigste. Alleine die Datenbank der *Chemical Abstracts* umfaßt mehr als zehn Millionen solcher Strukturformeln. Obwohl sich diese Darstellungsweise bisher als sehr nützlich erwiesen hat, stellt sich heute die Frage, ob sie sich nicht überlebt hat. Zweidimensionale Formeln sind nämlich für die Computerspeicherung ziemlich ungeeignet, denn sie müssen im gleichen Format und mit der gleichen Orientierung gezeichnet werden, damit ein Strukturvergleich überhaupt möglich ist. Der Vergleich von Strukturen und die Beurteilung ihrer Ähnlichkeit ist im vergangenen Jahrzehnt sehr wichtig geworden, nachdem man erkannt hatte, daß solche Untersuchungen im Frühstadium des Moleküldesigns nützlich sein können. Dies gilt besonders für die Planung neuer Pharmaca und Agrochemikalien. Außerdem ist die Bestimmung der Stereochemie oder der Chiralität von Molekülen für viele aktuelle Fragen der Chemie wichtig. Es überrascht daher kaum, daß Chemiker sich nun mit Nachdruck mit der dreidimensionalen Darstellung von Molekülen befassen.

Das vorliegende Buch ist ein wichtiger und innovativer Schritt in diese Richtung. Es stammt von der Informationsstudien-gruppe der Universität Sheffield, die nachweislich weltweit bei der Entwicklung neuer Ansätze zur Handhabung dreidimensionaler Strukturdaten am aktivsten ist. Die Autorin konzentriert sich auf die Techniken zur Abfrage dreidimensionaler Strukturen aus Datenbanken, wobei der Schwerpunkt auf der Suche nach Ähnlichkeiten liegt. Nachdem sie die Beschränkungen der zweidimensionalen Suche hervorgehoben hat, analysiert die Autorin die Einsatzmöglichkeiten und Effizienz von vier dreidimensionalen Ähnlichkeitsmethoden, nämlich der Distanzverteilungsmethode, der Verwendung individueller Abstände, der Atomabbildungsmethode und der Methode der größten gemeinsamen Teilstruktur. Sie kommt zum Schluß, daß insgesamt die Atomabbildungsmethode die beste ist. Dieses Verfahren beruht auf einer lokalisierten Beschreibung der dreidimensionalen Umgebung jedes Atoms in einem Molekül. Beim Vergleich zweier Moleküle werden Atome mit ähnlicher lokaler Umgebung aufeinander abgebildet, und die Ähnlichkeiten zwischen den so abgebildeten Atomen werden zu einem globalen Maß für die Ähnlichkeit der beiden Moleküle kombiniert. Der Rest des Buchs, einschließlich eines 30seitigen Anhangs mit Anwendungsbeispielen, ist der Diskussion der Atomabbildungsmethode gewid-

met. Unter anderem betrachtet die Autorin Wege zur Optimierung der Methode, zu ihrer Beschleunigung, und sie erweitert Ziele und Anwendungsgebiete der Methode. In der Tat kann das Verfahren mit entsprechenden Anpassungen nicht nur auf relativ kleine Moleküle, sondern auch auf Makromoleküle angewendet werden.

Mit der Vorstellung dieses ganzen Stoffs in einem Band erweist die Autorin Chemikern aus vielen Gebieten der Chemie einen großen Dienst. Die Suche nach Strukturen ist heute die häufigste Abfrageart bei chemischen Datenbanken, und die Nachfrage wird in Zukunft vermutlich deutlich zunehmen. Das vorliegende Buch behandelt nicht nur das immer dringlichere Problem der Speicherung und Bearbeitung von dreidimensionalen Daten, sondern zeigt auch, wie Ähnlichkeitsbegriffe erfolgreich für die Suche nach solchen Daten benutzt werden können. Obwohl die Methode in ihrer derzeitigen Form die Datenflut sehr großer Datenbanken nicht bewältigen kann, ist sie doch für mittelgroße Datenbanken mit bis zu 50000 Strukturen geeignet. Außerdem werden neue Entwicklungen, an denen zur Zeit gearbeitet wird, diese Grenze in naher Zukunft zweifellos deutlich hinausschieben. Die Atomabbildungsmethode hat viele Anwendungsmöglichkeiten und wird vor allem im Bereich des Moleküldesigns eingesetzt werden. Der Autorin gebührt Dank dafür, daß sie einen so nützlichen und bündigen Führer zu diesem sich rasch veränderndem Gebiet geschrieben hat.

Dennis H. Rouvray
University of Georgia
Athens, GA (USA)

Structure and Properties of Polymers. (Reihe: Materials Science and Technology, Vol. 12.) Herausgegeben von E. L. Thomas. VCH Verlagsgesellschaft, Weinheim/VCH Publishers, New York, 1993. 786 S., geb. 430.00 DM/325.00 \$. – ISBN 3-527-26825-1/0-89573-700-0

Der vorliegende Band ist Teil einer Serie, die ein breites Spektrum der Materialwissenschaften abdeckt. Die Serie ist als Nachschlagewerk sowie zum systematischen Studieren gedacht. Dabei soll jedes Kapitel so umfangreich sein, daß es ausführlicher als eine Enzyklopädie, jedoch kompakter als eine Monographie ist. Die Serie ist an eine breite Leserschicht gerichtet und eignet sich auch, um sich einen Überblick über neuere Entwicklungen auf einem Nachbargebiet zu verschaffen.

Ein enorm weites Spektrum überdeckend, gibt das Buch einen Überblick über die Teilgebiete der modernen Polymerphysik. In 13 Kapiteln werden die Gebiete Struktur, elastische, viskoelastische und rheologische Eigenschaften sowie dielektrische und optische Eigenschaften behandelt. Drei weitere Kapitel berichten über hochfeste Polymerfasern, polymere Oberflächen und Grenzschichten mit anderen Materialien sowie Rißbildung und Bruchverhalten von Polymeren.

Den Anfang macht ein Kapitel von L. J. Fetters und E. L. Thomas über die Synthese von Modellpolymeren, das auch die neueste Literatur auf diesem Gebiet berücksichtigt. Das zweite Kapitel (F. T. Gentile und U. W. Suter), das sich mit amorphen Polymeren beschäftigt, gibt einen guten Überblick über Strukturmodelle (static atomistic modeling), insbesondere wird das von Theodoru und Suter vorgeschlagene Modell ausführlich beschrieben. Ferner wird die Diffusion von kleinen Molekülen in Polymeren im Glaszustand behandelt. Besonders gefällt mir das Kapitel über die Struktur von polymeren Einkristallen (B. Lotz und J. C. Wittmann), das nahezu alle Aspekte der Entstehung, Struktur und Eigenschaften von Einkristallen bis hin zu deren Deformation enthält. Zwar werden die experimentellen Methoden zur Untersuchung polymerer Einkristalle nur gestreift, aber das Kapitel ist trotzdem eine Fundgrube für den interessierten Leser. Anders das folgende Kapitel über Kristallisation und Morphologie (P. J. Barham). Hier nehmen die experimentellen Methoden (Streumethoden, Mikroskopie, Spektroskopie, Kalorimetrie) einen breiteren Raum ein, ohne daß die Grundlagen (Keimbildung und Kristallisation, Strukturtypen, Modelle) zu kurz kommen. Flüssigkristalline Polymere, die heute von besonderem Interesse sind, werden im fünften Kapitel behandelt (M. Ballauff). Das Kapitel ist sehr verständlich geschrieben und liest sich wie eine Einführung in die Physik der LC-Polymere. Kapitel 6 behandelt die Struktur von polymeren Blends (T. Hashimoto). Natürlich kann auf 41 Seiten keine erschöpfende Behandlung dieses sehr umfangreichen Gebiets erwartet werden, dennoch bleibt der Text nicht nur an der Oberfläche. Phasendiagramme, Formierung der Mikrophasen und spinodale Entmischung in Zweikomponentensystemen werden ausreichend dargestellt und diskutiert.

Es folgen einige Kapitel, die sich im wesentlichen mit der Mechanik von Polymeren befassen: „Elastic Properties of Crystalline Polymers“ (D. T. Grubb), „Rubber Elasticity“ (R. Ullmann), „Visco-

elastic and Rheological Properties“ (M. Doi) und „Plastic Deformation of Polymers“ (B. Christ). Zusammen mit den Kapiteln „High Performance Polymer Fibres“ (H. Jiang, W. W. Adams und R. K. Eby) und „Crazing and Fracture of Polymers“ (I. Narisawa und A. F. Yee) vermitteln diese Beiträge weit mehr als einen Überblick über dieses wichtige Gebiet der Polymerphysik. Sowohl Grundlagen als auch Meßmethoden und Modelle wie das mechanische Modell von Takayanagi, das Mooney-Rivlin-Modell der Gummielastizität und das Rouse-Modell werden ausführlich behandelt.

Sehr inhaltsreich, aber doch flüssig zu lesen sind die beiden Kapitel über dielektrische (G. Williams) und optische (W. Knoll) Eigenschaften von Polymeren; letzteres streift auch die modernen Gebiete optische Leiter und Optoelektronik. Das Kapitel „Polymer Surfaces and Interfaces with other Materials“ (M. Tirrell und E. E. Parsonage) kann, wie die Autoren selbst schreiben, nicht alle Aspekte dieses weiten Gebiets behandeln. Es konzentriert sich auf feste Polymere und läßt z.B. Wechselwirkungen mit Lösungsmitteln, Adsorbatoberflächen und Quellungsphänomene aus.

Insgesamt ist festzustellen, daß die Autoren nur selten ins Detail gehen. Das mag der bedauern, der sich in ein spezielles Gebiet gründlich einarbeiten will, es erspart jedoch dem Leser, der sich einen Überblick verschaffen will, längliche Ableitungen. Trotz der insgesamt 22 Autoren ist der Band erstaunlich homogen; die ordnende Hand des Herausgebers ist überall zu spüren. Das Buch ist nicht nur Fachleuten zu empfehlen, sondern ohne Zweifel auch interessierten Studenten, besonders Diplomanden und Doktoranden der Polymerphysik.

Structure Property Relations in Polymers. Spectroscopy and Performance. (Reihe: *Advances in Chemistry*, Vol. 236.) Herausgegeben von M. U. Urban und C. D. Craver. ACS, Washington, D.C., 1993. 832 S., geb. 139.95 \$. – ISBN 0-8412-2525-7

Dieses Buch enthält ausgewählte Beiträge über Fourier-Transform (FT)-Infrarot-, FT-Raman- und Fluoreszenzspektroskopie sowie Massenspektrometrie von Polymeren des „200th National Meeting of the American Chemical Society“ in Washington, D.C., 1991. Im Vorwort erhebt es den Anspruch, eine Brücke zwischen den molekularen Daten, die den genannten spektroskopischen Methoden zugänglich sind, und spezifischen makroskopischen Eigenschaften zu schlagen. Es

wendet sich an Einsteiger in das Feld der Polymer-Spektroskopie, aber auch an erfahrene Spezialisten. Ein ehrgeiziges Projekt, das, wie ich meine, in einigen Abschnitten recht gut gelungen ist.

Die insgesamt 35 Beiträge sind in sechs Kapitel aufgeteilt, die das Buch nicht nur thematisch ordnen, sondern ihm an einigen Stellen einen monographieähnlichen Charakter geben.

Das erste Kapitel über fundamentale Konzepte der Spektroskopie von Polymeren behandelt die Grundlagen und neueren Entwicklungen der Methoden FT-Infrarot- und -Raman-Spektroskopie, Fluoreszenzspektroskopie und Massenspektrometrie. Gedacht als Einführung in die Prinzipien der jeweiligen Technik, enthält es bereits einige neuere Entwicklungen wie die Anwendung multivariater Datenverarbeitung auf dem Gebiet der Polymeranalyse.

Die folgenden Kapitel behandeln die Anwendung der vorgestellten Methoden auf polymerphysikalische Probleme, so auch das zweite Kapitel, das sich mit kristallinen Polymeren und Copolymeren beschäftigt. Interne und longitudinale Moden des Raman-Spektrums lassen sich zur strukturellen Analyse kristalliner polymerer oder topotaktischer Änderungen während der Festkörperpolymerisation verwenden. Ferner werden interessante Ergebnisse der FTIR-Spektroskopie zur Analyse des Phasenverhaltens und zum Studium der molekularen Wechselwirkung von Polymerblends vorgestellt. Die Anwendbarkeit der nahen IR-Spektroskopie für die qualitative Analyse von 25 Thermoplasten wird von H. E. Howell und J. R. Davis diskutiert.

Das dritte Kapitel behandelt polymere Oberflächen und Grenzflächen. Untersucht und diskutiert werden die Rolle von oberflächenaktiven Substanzen für die Latex-Technik und Messungen an dicken Filmen. Für sehr interessant halte ich den Beitrag von L. J. Fina über Gradientenmodeling an Polymeroberflächen. Bemerkenswert ist auch ein Artikel von M. B. Mitchell über Methode und Anwendung von Diffuse-Reflectance-Infrared-Fourier-Transform (DRIFT)-Messungen. Coatings spielen eine immer größere Rolle in der Kunststofftechnik; der Beitrag von M. Claybourn und P. H. Turner über FTIR- und FT-Raman-Messungen an Coatings ist daher lesenswert. Ferner werden FT-Raman-Untersuchungen an Farben beschrieben sowie die Aufnahme von Raman-Spektren während der Emulsions-Polymerisation.

Acht Beiträge finden sich im Kapitel über spektroskopische Studien an Polymeren in Lösung und polymeren Netz-