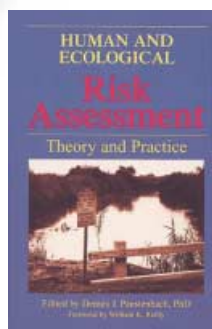




### Human and Ecological Risk Assessment Theory and Practice



Herausgegeben von Dennis J. Paustenbach. Wiley-Interscience, New York 2002. 1156 S., geb., 150.00 \$.— ISBN 0-471-14747-8

Unter den zahlreichen Büchern zur Risiko-Thematik im Bereich Umweltschutz aus der jüngeren Zeit fällt das vorliegende durch sein umfangreiches Volumen von mehr als 1500 Seiten ins Auge. Es enthält viele, von namhaften Autoren verfasste Kapitel und gleich zwei Vorworte, in denen sich prominente Persönlichkeiten der US-Behörde EPA („US Environmental Protection Agency“) sehr kompetent zu dem gesamten Themenbereich äußern.

Das Thema Risiko ist derzeit so aktuell und zugleich spannend, dass man über jeden vernünftigen Beitrag froh sein muss. Wenn dieses umfangreiche Thema von zahlreichen Fachleuten aktuell und kundig bearbeitet wird und diese Arbeit noch mit zwei sehr wohlwollenden Vorworten begleitet wird, so sollte einem solchen Buchprojekt ein positiver Erfolg beinahe garantiert sein. In der Tat bietet das Buch eine gut aufbereitete Materialsammlung und ist insofern jedem interessierten Leser sicherlich nützlich. Dieser sehr positive Gesamteindruck wird etwas dadurch getrübt, dass einige wesentliche Chancen doch leider nicht genutzt wurden: Zunächst ist festzustellen, dass der Titel „Human and Ecological Risk Assess-

ment: Theory and Practice“ nicht die umfassende Behandlung widerspiegelt, die mit den vielfältigen Beiträgen im Buch selbst angestrebt wird. So geht es beileibe nicht nur um das „risk assessment“, sondern auch um die Kommunikation, die Akzeptanz und das Management von Risiken. Dieser unbedingt erforderliche, ganzheitliche Ansatz zur Bearbeitung des Themas Risiko hätte bereits im Titel seinen Niederschlag finden sollen.

Jedoch nicht nur der Titel ist allzu „ausschnitthaft“, auch die Auswahl der Autoren und darüber hinaus der betrachteten Fallbeispiele lässt leider eine Erörterung auf internationaler Ebene schmerzlich vermissen. Das Thema Risiko gewinnt in einer globalen Wirtschaftswelt eine immer größere Bedeutung, der man durch ein internationales Autorenteam hätte Rechnung tragen sollen. So fehlen Beiträge aus der Feder prominenter europäischer Fachleute, die ohne Frage gerade zu den gesellschaftlich-politischen Aspekten der Risiko-Thematik wesentliche Beiträge geleistet hätten. Diese starke Zentrierung auf die US-amerikanische Sichtweise wird bei den zitierten Quellen weithin sichtbar. Nichtamerikanische Quellen werden praktisch kaum zitiert, und wo dieses dann einmal geschieht, entstehen gewisse Peinlichkeiten. Hierzu gehört beispielsweise das Zitat des berühmten Buches *De re metallica*. Dieses bedeutende Werk des Universalgelehrten Georgius Agricola aus dem Jahre 1556 mit der Quellenangabe „1950, Dover, New York“ zu belegen, ist schon mehr als irreführend und bedenklich. Dabei geht es nicht um ein bibliophiles Missbehagen, sondern es greift deutlich weiter.

Sehr zu begrüßen ist der Ansatz des Buches, theoretische und praktische Aspekte voneinander zu trennen. Dies gelingt allerdings in der wünschenswerten Vollkommenheit nicht. So beginnen die ersten Kapitel zwar mit der Darstellung der naturwissenschaftlichen Grundlagen und der daraus gebildeten Theorien, jedoch werden die für ein angemessenes Verständnis erforderlichen gesellschaftswissenschaftlichen Grundlagen am Ende des Buches vermittelt, nachdem bereits verschiedene Fallbeispiele diskutiert wurden. Eine in sich geschlossene, kohärente Darstel-

lung der Theorie in wissenschaftlicher, technischer sowie gesellschaftswissenschaftlicher Hinsicht am Anfang des Buches wäre da sehr viel hilfreicher gewesen.

Die Auswahl der Fallbeispiele ist darüber hinaus nicht immer sehr glücklich und hat den Charakter einer eher zufälligen Selektion, was möglicherweise durch die Auswahl US-amerikanischer Autoren bedingt sein kann. Die Bezugnahme auf wichtige Szenarien aus Europa oder Japan fehlt. Gerade diese Vorfälle waren aber für die Entwicklung und den Fortschritt der Bearbeitung des Risiko-Themas von erheblicher Bedeutung (Minamata, Sandoz, Seveso, Tschernobyl).

Die beiden Vorworte des Buches gehören zu den lesenswertesten Stellen. Im Sinne der Vorgaben könnte das Buch ohne Verlust an Bedeutung in den nachfolgenden Kapiteln erheblich gestrafft werden. Eine konsequenter Gliederung im theoretischen und praktischen Teil wäre sehr angebracht und würde dem Buch den Charakter nehmen, wie eine Artikelsammlung in einer Illustrierten zu wirken. Eine zusammenfassende objektive Würdigung dieser sicher mit großem Fleiß zusammengetragenen Beitragssammlung fällt nicht leicht und könnte am ehesten mit dem Prädikat „brauchbar, aber nicht unbedingt erforderlich“ beschrieben werden.

Herwig Hulpke  
Bayer AG, Leverkusen

### Valence Bond Methods



Theory and Applications. Von Gordon A. Gallup. Cambridge University Press, Cambridge 2002. 238 S., geb., 65.00 £.— ISBN 0-521-80392-6

Molekülorbital(MO)- und Valence-Bond(VB)-Methoden sind komplementäre Ansätze, um die elektronische Wel-

lenfunktion eines Mehrelektronensystems zu approximieren. Beide benutzen das gleiche Rohmaterial, einen Satz von Atomorbitalen (AO) und eine gegebene Anzahl von Elektronen. Bei einer MO-Berechnung ist der erste Schritt eine Kombination dieser Atomorbitale und die Optimierung ihrer Koeffizienten mithilfe der Variationsrechnung zu einem Satz delokalisierter Molekülorbitale. In einem zweiten Schritt werden die Molekülorbitale mit Elektronen besetzt, was eine MO-Konfiguration ergibt. Wenn eine einzelne MO-Konfiguration keine ausreichend genaue Beschreibung der Wellenfunktion darstellt, lässt sich in einem dritten Schritt eine Verbesserung erhalten, indem man andere MO-Konfigurationen beimischt und deren Gewichte mit der Variationsmethode optimiert (Konfigurationswechselwirkung). Bei einer VB-Berechnung werden der erste und zweite Schritt dieser Prozedur dadurch ersetzt, dass man Atomorbitale und Elektronen zu einer VB-Konfiguration kombiniert. Eine Verbesserung ist durch Mischung mit anderen VB-Konfigurationen möglich. Im Grenzfall vollständiger Konfigurationswechselwirkung werden die MO- und die VB-Wellenfunktion für denselben Satz von Atomorbitalen identisch.

Obwohl historisch gesehen der VB-Ansatz der ältere ist, haben MO-Berechnungen VB-Berechnungen praktisch verdrängt, weil sie einfacher zu implementieren sind. Als wesentlicher Nachteil sind VB-Konfigurationen nicht orthogonal. Ihr Hauptvorteil ist aber, dass sie sich unmittelbar in Konzepte übersetzen lassen, mit denen ein Chemiker vertraut ist (kovalente Bindung, zwitterionische Struktur usw.). Insbesondere haben sich qualitative oder halbquantitative VB-Argumente als außerordentlich nützlich für die Beschreibung chemischer Reaktionen erwiesen (siehe die Arbeiten von Shaik und anderen) – es dürfte keine Übertreibung sein, dass dies der stärkste Punkt des VB-Konzeptes und wahrscheinlich verantwortlich für dessen wiedergewonnenes Interesse in jüngerer Zeit ist. Leider ignoriert Gallups Buch diese Aspekte fast vollständig, sodass sein Titel recht irreführend ist. Es befasst sich stattdessen ausschließlich mit numerischen Berechnungen an kleinen, in der Hauptsache zweiatomigen Molekülen. „Ab initio valence bond calculations“

wäre sicher ein passenderer Titel gewesen.

Das Buch ist in zwei Teile von fast gleicher Länge gegliedert, deren erster mit „Theory and Two-Electron Systems“ betitelt ist. Nach einer „Introduction“, die einen Teil des mathematischen Hintergrundes in aller Kürze skizziert, werden in „H<sub>2</sub> and Localized Orbitals“ die Auswirkungen der Größe des Basissatzes und der Zahl der betrachteten VB-Konfigurationen auf die Potentialkurve des Wasserstoffmoleküls detailliert untersucht. Im Kapitel „H<sub>2</sub> and Delocalized Orbitals“ werden Berechnungen eingeführt, bei denen eine geringere Zahl von VB-Konfigurationen (bei diesem Molekül nur eine einzige), aber Orbitale, die sich über mehr als ein Atom erstrecken, verwendet werden. Dieses kurze Kapitel und das (ebenfalls sehr kurze) folgende, „Three Electrons in Doublet States“, vermitteln einige der Grundlagen für die beiden wesentlichen Kapitel des ersten Teils: „Advanced Methods for Larger Molecules“ und „Spatial Symmetry“. Hier wird darauf eingegangen, wie sich im allgemeinen Fall VB-Konfigurationen erhalten lassen, die die geforderte Antisymmetrie besitzen und mit der Molekülsymmetrie kompatibel sind. Zwei sehr kurze Kapitel, „Varieties of VB Treatments“ und „The Physics of Ionic Structures“ beschließen den ersten Teil des Buches.

Der zweite Teil, „Examples and Interpretations“, umfasst Berechnungen für homo- und heteronucleare zweiatomige Moleküle der ersten und zweiten Periode sowie für einige größere Moleküle, nämlich Methan, Ethan, Ethylen, das Allylradikal, Cyclopropan, Formaldehyd, Benzol und Naphthalin.

Hinsichtlich der Aktualität des Buchs ist auffällig, dass mehr als drei Viertel (55) der 71 Literaturzitate älter sind als 20 Jahre und dass sich mindestens die Hälfte der 10 Zitate aus der letzten Dekade auf Nebenschauplätze bezieht. Außerdem diskutiert der Autor im gesamten Teil „Examples and Interpretation“ offensichtlich nur seine eigenen Resultate. Das folgende Beispiel, das sich mit der Frage befasst, ob der Benzolring wegen oder trotz der Resonanz im  $\pi$ -System ein reguläres Sechseck ist, fand ich besonders irritierend. Auf Seite 207 ist zu lesen: „There has

developed over the years a considerable literature on this question, with many opinions on both sides. Shaik et al. have written articles on this subject [62, 63]. Such a situation frequently indicates the existence of ambiguities in the definition. We may describe the situation according to our current terms.“ Danach fährt der Autor mit seiner Analyse fort, ohne auch nur ein einziges Mal zu erwähnen, in welcher Hinsicht sich die anderen „many opinions“ von seiner Interpretation unterscheiden. Das lässt sich schwerlich als ausgewogene Darstellung ansehen.

Wie man auf dem Umschlag liest, ist das Buch gedacht für „researchers and students working on molecular electronic theory and computation in chemistry and chemical physics“. Es richtet sich also offensichtlich nicht an den Nichtspezialisten. In der Tat ist schwer zu sagen, welchen Gewinn ein Chemiker oder Physiker, der kein Theoretiker ist, aus ihm ziehen könnte, weil das Thema sehr spezialisiert ist und diejenigen Anwendungen von VB-Methoden, die die meisten chemischen oder physikalischen Einsichten vermitteln, mit Absicht ausgeklammert wurden (siehe oben). Der Nutzen als Lehrbuch, selbst für einen fortgeschrittenen Studenten, scheint ebenfalls zweifelhaft. Dafür ist der Ausgangspunkt auf einem viel zu hohen Niveau angesiedelt, oder vielmehr: Es klafft eine große Lücke zwischen elementaren Konzepten (wie der Schrödinger-Gleichung oder der Verwendung atomarer Einheiten), die in unnötiger Breite erklärt werden, und hochspezialisierter Materie, die klar außerhalb der Wissenssphäre von Studierenden liegt, wie etwa die Algebrasymmetrischer Gruppen. Bei der Behandlung letzterer war mein Eindruck, dass eine didaktische Präsentation zugunsten einer formal strengen Herleitung geopfert wurde. Als einziger Leser verbleibt somit der Spezialist, der sich für VB-Berechnungen interessiert. Dieser könnte wahrscheinlich von dem Buch profitieren, sofern er bereit ist, die oben erwähnten Einschränkungen hinsichtlich der Aktualität und der Ausgewogenheit zu übersehen.

Martin Goez  
Fachbereich Chemie  
Universität Halle/Saale