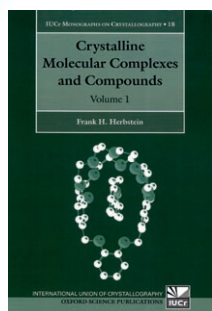




Crystalline Molecular Complexes and Compounds



2 Bde. Von Frank H. Herbstein. Oxford University Press, Oxford 2006. 1274 S., geb., 249.50 \$.—ISBN 0-19-852660-1

Frank Herbsteins lang erwartete Monographie ist nun vorliegend als zweibändiges Werk in der Serie „IUPAC Monographs on Crystallography“ erschienen. Manche Kollegen und Freunde Herbsteins werden sich daran erinnern, den Autor viele Male darauf angesprochen zu haben, endlich einen Erscheinungstermin der Bände festzulegen, deren Fertigstellung letztlich länger als die wissenschaftliche Laufbahn des Rezensenten dauerte. Das Ergebnis indes gibt Zeugnis von der Beharrlichkeit des Autors.

Die systematische Analyse von Kristallpackungen, das zentrale Thema der Bände, gehört zu den wichtigsten anwendungsbezogenen und akademischen Forschungsgebieten. Die Kristallpackung ist das Ergebnis intermolekularer Wechselwirkungen, die von der Enzym-Substrat-Erkennung bis hin zu den Kräften in hochwiderstandsfähigen Polymeren reichen. Als vor ungefähr 50 Jahren die ersten ernsthaften Kristallstrukturanalysen organischer Verbindungen ausgeführt wurden, nahm die Aufklärung einer einzigen Struktur Monate in Anspruch, und man hatte, wenn überhaupt, wenig Zeit für eine systematische Erfassung des Materials.

Dann begannen allmählich Buchserien wie Wyckoffs *Crystal Structures* und die Allen-Kennard-Bände vom Cambridge Crystallographic Data Centre zu erscheinen. Mit den Entwicklungen im Computerbereich wuchs dann die Datenmenge ins Unüberschaubare, und heute sind per Knopfdruck gewaltige Listen von Strukturparametern abrufbar. Und doch kann kein Computerchip den kritischen Menschenverstand ersetzen. In diesem Sinne wirft dieses Buch nicht etwa einen neuen Blick auf altes Material, sondern vielmehr einen alten Blick auf neues Material. Es ist eine Goldgrube von exegetischer Kraft und eine methodologische Lehrstunde: Es ist der Mensch, der die Chemie kennt, nicht der Computer!

Das Fundament des Buches bilden unzählige, aus der Cambridge Structural Database gewonnene Strukturdaten, wobei zu jeder Struktur der Cambridge Refcode und die entsprechende Literaturstelle angegeben sind. Die Zahl der Literaturhinweise geht in die Tausende. Diese ungeheure Menge an Daten erfordert eine sorgfältige Benennung und Klassifizierung – eine Aufgabe, der sich Frank Herbstein mit fast linnéscher Genauigkeit widmet: Man findet Wasserstoffbrücken, Addukte, Einschlussverbindungen, Clathrate, Intercalate, Donor-Acceptor- und Charge-Transfer-Verbindungen, aber auch Exotischeres wie Hemisphärenten, Sphäraplexe und Hemicarceplexe. Eine kritische Klassifizierung gehört zu den Dingen, die eine Computersuche nicht erledigen kann. Gemeinsame und übergreifende Eigenschaften werden einer eingehenden Prüfung unterzogen, was allerdings unvermeidbar werden lässt, dass sich der Leser mit langen Listen von Zellparametern und Raumgruppen auseinandersetzen muss.

Geometrische Informationen wie Bindungslängen und Torsionswinkel werden sorgfältig überprüft, ebenso wie auch intermolekulare Anordnungen wie Ketten, Schichten oder Stapel neben ausgewählten Atom-Atom-Abständen, die in zahllosen Moleküldiagrammen dargestellt sind. Diese Analyse dient als Grundlage für eine einführende Diskussion über zwischenmolekulare Kräfte. Spektroskopische, thermodynamische und andere physikochemische Daten werden, soweit sie verfügbar

sind, ebenfalls angegeben und im Zusammenhang mit den Strukturparametern kritisch beurteilt (einige der zitierten Autoren dürften über die Ergebnisse dieser Prüfung nicht erfreut sein). Spezialisten für binäre Kristalle werden harte Fakten für ihre Arbeit finden, dem beiläufigen Leser bietet sich eine hervorragende Gelegenheit, Strukturvergleiche anzustellen.

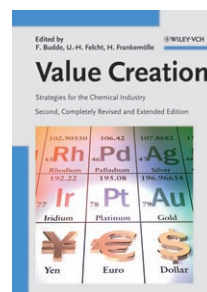
Letztlich bleibt es beeindruckend zu sehen, auf welch vielfältige Weise sich Atome und Moleküle zusammenlagern können. Dies widerlegt die einstige Einschätzung, die Kristallisation diene nur zum Zwecke der Trennung und Reinigung. Frank Herbstein überzeugt uns, dass dies nicht der Fall ist, und er nimmt einen weiten Weg auf sich, um uns das zu erklären.

Angelo Gavezzotti

Dipartimento di Chimica Strutturale
Università di Milano (Italien)

DOI: 10.1002/ange.200685397

Value Creation



Strategies for the Chemical Industry. 2., üb. und erw. Aufl. Herausgegeben von Florian Budde, Utz-Hellmuth Felcht und Heiner Frankemölle. Wiley-VCH, Weinheim 2006. 470 S., geb., 85.00 €.—ISBN 3-527-31266-8

Es sei vorweggeschickt: Ein solches Buch über Wertschaffung in der chemischen Industrie hätte sich der Rezensent zu Beginn seiner Industrielaufbahn gewünscht! Die drei Herausgeber haben das Kunststück fertiggebracht, mit 33 Einzelkapiteln, geschrieben von insgesamt über 50 Autoren, einen auch für Nichtchemiker durchweg leicht lesbaren und verständlichen roten Faden durch die komplexe Thematik zu ziehen. 35 der 54 Autoren sind Mitarbeiter des Beratungsunternehmens McKinsey und