

Physikalische Anorganische Chemie. Von *M. D. Sienko* und *R. A. Plane*. Übers. u. ergänzt von *F. Steinbach*. S. Hirzel, Stuttgart 1965. 1. Aufl., 46 Abb., 32 Tab., 169 S., kart. DM 18.—.

Es gehört einiger Optimismus dazu, alle die Teilgebiete der physikalischen und der theoretischen Chemie, mit denen der Anorganiker es immer wieder zu tun hat, auf 169 Seiten Kleinformat verständlich darstellen zu wollen. Die Fülle des dargebotenen Stoffs, die vielen nützlichen Tabellen und die leichte Lesbarkeit lassen das vorliegende Buch als für den Anfänger besonders geeignet erscheinen, der nicht vorhat, jede Einzelheit zu verstehen und sich zu merken, sondern dem es auf einen allgemeinen Überblick ankommt. Präzision ist nicht die Stärke des Buches, und man hat nicht immer, vor allem in den Kapiteln über Atom- und Molekültheorie, den Eindruck, als hätten die Verfasser selbst das völlig verstanden, wovon sie schreiben. Dieser Eindruck ist wahrscheinlich in der deutschen Übersetzung noch stärker als im Original. Der deutsche Text ist an vielen Stellen holprig. Allzu wörtlich aus dem Englischen übersetzte Ausdrücke entsprechen oft nicht dem deutschen Sprachgebrauch. Statt „Normalisierung“ sollte es z.B. „Normierung“ heißen, statt „Orbitalquantenzahl“ „Nebenquantenzahl“. Legendre-Polynome sind keine Kugelfunktionen, „Valence bond“ wird üblicherweise nicht mit „Valenzbindung“ wiedergegeben, und Hybridisierung und Entartung sind völlig verschiedene Dinge. Es gibt kein „Verfahren, Resonanz genannt“. „Der“ Orbital klingt merkwürdig, wenn man an „das“ Orbital gewöhnt ist. Zum theoretischen Teil wird dem Leser empfohlen, zusätzlich eine gründlichere Darstellung heranzuziehen.

W. Kutzelnigg [NB 562]

Advances in Quantum Chemistry, Vol. 2. Herausgeg. von *P. O. Löwdin*. Academic Press, Inc., New York-London 1965. 1. Aufl., XI, 372 S., 79 Abb., geb. \$ 14.50.

Ähnlich wie im ersten Band der Reihe sind hier Übersichtsartikel über Teilbereiche der Quantenchemie, die von allgemeiner Theorie über ab-initio-Rechnungen bis zu semiempirischen Anwendungen reichen, zusammengefaßt. Streng genommen sind nicht alle Beiträge wirklich Übersichtsartikel; der Aufsatz von *McWeeny* und *Steiner* über die Theorie der „paarkorrelierten Wellenfunktionen“ beispielsweise hat durchaus den Charakter einer Originalarbeit.

S. F. Boys und *P. Rajagopal* gehen in ihrem Bericht „Quantum Calculations“ auf spezielle Probleme der numerischen ab-initio-Rechnungen an kleinen Molekülen ein. *Inga Fischer-Hjalmars* faßt frühere Arbeiten anderer Autoren und neuere eigene zusammen, die sich mit der Begründung für die Vernachlässigung der differentiellen Überlappung in der Theorie der π -Elektronensysteme auseinandersetzen. Die Theorie der Hyperfeinstruktur in Atomspektren (auch in Ionen und Komplexen) ist Gegenstand des Beitrages von *S. M. Blinder*, dem eine sehr ausführliche Bibliographie beigegeben ist.

McWeeny und *Steiner* diskutieren die Theorie der paarkorrelierten Wellenfunktionen — so wie sie vor allem von *Sinanoğlu* propagiert wurden — in einer strengeren Weise im Rahmen der Störungstheorie. *L. Jansen* erläutert in einem ausführlichen Artikel „Quantum Chemistry and Crystal Physics“ in fesselnder Weise, daß zur Erklärung der relativen Stabilität verschiedener Kristallgitter der Edelgase und der Alkalihalogenide Wechselwirkungen kurzer Reichweite zwischen drei Atomen oder Ionen eine wesentliche Rolle spielen. Auf die möglichen Mechanismen einer Wechselwirkung großer Moleküle unter biologischen Bedingungen geht *H. Jehlen* ein.

Mehr als das letzte Drittel des Buches nimmt ein Beitrag des Herausgebers, *P. O. Löwdin*, „Quantum Genetics and the Aperiodic Solid“ ein, in dem dieser seine nicht unumstrittenen Vorstellungen über den Zusammenhang zwischen dem Tunneln von Protonen in Nucleinsäuren und speziellen Aspekten der Vererbung darlegt.

W. Kutzelnigg [NB 568]

Kleine Quantenmechanik. Von *W. Wessel*. Physik-Verlag GmbH., Mosbach/Baden 1966. 1. Aufl., 161 S., 46 Abb., Ganzleinen DM 16.80.

Der Autor möchte, wie er einleitend sagt, etwa den Leserkreis unter den Nichtphysikern ansprechen, der sich in den zwanziger Jahren von *Sommerfelds* „Atombau und Spektrallinien“ hätte begeistern lassen. — Gut herausgearbeitet sind der Teilchen-Wellen-Dualismus sowie die besondere Rolle von Wahrscheinlichkeitsaussagen in der Quantentheorie, wobei der Autor — trotz einer Neigung zu schönggeistigen Einlagen — in Bezug auf philosophische Schlußfolgerungen sehr zurückhaltend ist. Im Kernstück des Buches wird der Weg, der seinerzeit *Heisenberg* zur Aufstellung der Matrizenmechanik führte, so einfach es nur geht, nachvollzogen.

Das Verständnis wird dadurch erschwert, daß entscheidende (und auch nebensächliche) Begriffe und Beziehungen unbegründet oder mit dem Hinweis, daß ihre Begründung zu schwierig wäre, gleichsam aus der Luft gegriffen werden. — Wer eine Einführung in den heute gängigen Formalismus der Quantenmechanik erwartet, um z.B. deren chemische Anwendungen besser verstehen zu können, wird von der Lektüre enttäuscht sein. Vielleicht ist es aber für den theoretisch interessierten Chemiker reizvoll, sich das ihm bekannte eindimensionale Elektronengasmodell unter dem Namen „Reflexionsoszillator“ einmal aus einer ganz anderen Sicht zeigen zu lassen.

W. Kutzelnigg [NB 563]

Anwendungen der kernmagnetischen Resonanz in der Organischen Chemie. Von *H. Suhr*. Organische Chemie in Einzeldarstellungen. Bd. 8. Springer-Verlag, Berlin-Heidelberg-New York 1965. 1. Aufl., VIII, 424 S., 123 Abb., 110 Tab., Gzln. DM 68.—

Dieses Buch spricht zunächst mit einer einfachen Einführung in die Kernresonanz-Spektroskopie denjenigen an, der zum ersten Mal mit dieser Methode in Berührung kommt. Weiterhin will es eine Anleitung zum Auswerten von Spektren organischer Verbindungen sein und hierfür Vergleichsmaterial bereitstellen. Der Autor versucht demnach keine strenge Herleitung der Gesetzmäßigkeiten aus der Theorie; er streift die Meßtechnik und die Probenvorbereitung nur flüchtig; auch wendet er sich weniger an Physikochemiker oder Spektroskopiker als an Organiker, die zur Strukturbestimmung die Kernresonanz benötigen, sie aber nicht in aller Ausführlichkeit betreiben können. Für den letztgenannten großen Interessentenkreis wird hier ein verständliches, empfehlenswertes Werk vorgelegt.

Die einleitenden 73 Seiten bringen die Grundzüge der chemischen Verschiebung und der Spin-Wechselwirkung. Die beiden Abschnitte über die Theorie der τ - und J-Werte (S. 28 und S. 45) sind qualitativ gehalten und erfüllen ihren Zweck aufs beste. Das Kapitel über Aufspaltungen höherer Ordnung sollte etwas mehr das praktische Vorgehen bei der Spektralanalyse herausarbeiten. Wiederholt wird geraten, theoretische Spektren mit Hilfe von Gleichungen oder Tabellen zu konstruieren. Es ist jedoch weit weniger zeitraubend, diese Arbeit einer Rechenmaschine zu überlassen; eine kurze Charakterisierung der für diesen Zweck verfügbaren Programme erscheint jedenfalls angebrachter als der Abdruck selten verwendeter Tabellen aus der Literatur (27 S.).

Der spezielle Protonenresonanz-Teil des Buches (172 S.) ist nach Stoffklassen gegliedert, etwa in der Art des IR-Werkes von *Bellamy*.

Die außerordentliche Fülle der hier zusammengetragenen Meßdaten und Literaturzitate stellt auch für den Fachmann eine hervorragende Quelle zum raschen Auffinden von Vergleichswerten dar. In einigen der zahlreichen und nützlichen Tabellen könnte allerdings die Übersichtlichkeit und Eindeutigkeit der angeführten Daten noch verbessert werden (z.B. S. 87, S. 93 und S. 134). Den neben dem Proton für die Organische Chemie wichtigen Kernen ist ein eigenes Kapitel