

The Chemistry of the Nitro and Nitroso Groups. Teil I. Herausgeg. von *H. Feuer*. Aus der Reihe „The Chemistry of Functional Groups“. John Wiley & Sons Ltd., London-New York 1969. 1. Aufl., XII, 771 S., zahlr. Formeln und Tab., 281s.

In der von *S. Patai* herausgegebenen Reihe „The Chemistry of Functional Groups“ ist der erste der beiden der Nitro- und der Nitroso-Gruppe gewidmeten Bände erschienen. Er enthält neun (von insgesamt zehn Autoren geschriebene) Kapitel über theoretische Aspekte der C—NO- und C—NO₂-Bindungen, die Spektroskopie und Photochemie der beiden Gruppen, Bildung und Reaktionen der Nitrosogruppe, Bildung aliphatischer und alicyclischer Nitroverbindungen, von Nitronsäuren und -estern sowie von Nitroamino-Gruppen. In einem Kapitel wird schließlich die Aktivierung nucleophiler aromatischer Substitutionen durch Nitrogruppen diskutiert.

Die Einleitung enthält außerdem eine Übersicht über Kapitel und Autoren des noch nicht erschienenen zweiten Bandes. Daraus geht z. B. hervor, daß erst dort die Bildung aromatischer Nitroverbindungen, der Einfluß der Nitrogruppe auf elektrophile und radikalische aromatische Substitutionen sowie die Meisenheimer-Komplexe von Nitroverbindungen diskutiert werden. Es ist klar, daß das als letztes erwähnte Thema des ersten Bandes in den allgemeinen Rahmen des zweiten Bandes gehört. Aus Bemerkungen im Vorwort kann man entnehmen, daß dieser mangelhafte Zusammenhang der Kapitel offenbar auf dem verspäteten Eingang einiger Manuskripte beruht. Unseres Erachtens wäre es Sache der Verlage, Mittel und Wege zu suchen, um diese grundsätzlichen Schwächen von „Mehrautoren-Büchern“ zu vermeiden. Da eine kritische Besprechung des ersten (fragmentarischen) Bandes ohne Kenntnisse des Inhalts des zweiten Teils den Verdiensten der Autoren, deren Kapitel bereits erschienen sind, nicht unbedingt gerecht werden kann, soll das Gesamtwerk erst nach Erscheinen des zweiten Bandes besprochen werden.

Heinrich Zollinger [NB 858]

The Molecular Orbital Theory of Organic Chemistry. Von *M. J. S. Dewar*. Aus der Reihe „McGraw-Hill Series in Advanced Chemistry“ McGraw-Hill Book Corp., New York 1969. 1. Aufl., XIV, 484 S., zahlr. Abb. u. Tab., geb. ca. DM 74.—.

Schon von der Anlage her ist das Buch überaus anspruchsvoll. Es stellt einen Versuch dar, die organische Chemie aus den Prinzipien der Quantenmechanik herzuleiten. In Kapitel 1 fährt der Verfasser so schwere Geschütze wie den Diracschen Bra-Ket-Formalismus auf und riskiert damit, Leser zu verschrecken, die dem Rest des Buches durchaus folgen könnten. In Kapitel 2 werden die quantenchemischen Nähe-

runismethoden besprochen, Kapitel 3 ist einer Diskussion der semiempirischen Methoden der Quantenchemie und Kapitel 4 einem Abriss der Theorie der Atome und kleiner Moleküle gewidmet. Zwei Drittel des Buches befassen sich mit den Eigenschaften organischer Moleküle, z. B. ihren Bindungsenergien und ihrer Stabilität sowie dem Problem der Aromatizität (Kapitel 5), ferner mit den Mechanismen chemischer Reaktionen (Kapitel 8). Die Theorie der UV-Spektren ist bewußt ausgeklammert, dagegen findet man (in Kapitel 7) etwas über die MO-Theorie der Elektronenspinresonanz. Ein besonderes Kapitel 9 ist den aromatischen Systemen mit Heteroatomen vorbehalten, und zum Abschluß (Kapitel 10) wird auch etwas zu dem aktuellen Gebiet der Quantenchemie der σ -Bindungen gesagt.

Methodisch im Mittelpunkt des Buches steht die Dewarsche (d. h. die für Eigenschaften der Grundzustände parametrisierte) Version der semiempirischen Pariser-Parr-Pople-Methode für die π -Elektronen, vom Verfasser kurz „Pople-Methode“ genannt, für deren Brauchbarkeit er überzeugende Vergleiche von Experiment und Theorie gibt. Die angegebene quantenmechanische Begründung der Pople-Methode (insbesondere für die sogenannte Vernachlässigung der differentiellen Überlappung) überzeugt dagegen nicht ganz. Sehr schön wird die Hückelsche-MO-Methode (HMO) aus derjenigen von *Pople* abgeleitet, weil man anhand dieser Ableitung deutlich die Grenzen, aber auch die Möglichkeiten der HMO-Methode erkennt (vorausgesetzt allerdings, daß man sich von der Zulässigkeit der Popleschen Näherungen vorher hat überzeugen lassen).

Als Alternative zur Pople-Methode bietet der Verfasser eine störungstheoretische Vereinfachung der HMO-Methode, die sich insbesondere der Eigenschaften alternierender Kohlenwasserstoffe bedient, unter dem Namen PMO-Methode an. Diese ist sehr anschaulich und sicher überaus nützlich, da sie zu wichtigen Ergebnissen ohne Rechnung führt, aber sie ist nicht so unproblematisch, wie man nach der Lektüre von Kapitel 6 denken könnte.

Mit einer Reihe von althergebrachten falschen Vorstellungen räumt das Buch auf, wobei aber die oft wohlthuende Polemik bisweilen auch über das Ziel hinausschießt.

Daß der Autor seine eigenen Beiträge besonders, an manchen Stellen über Gebühr, herausstellt, wird man ihm nicht verdenken, obwohl er besser der Versuchung widerstanden hätte, z. B. die sogenannte „SPO-Methode“ unterzubringen, die weder in ihrer ersten noch ihrer zweiten Fassung mehr als historisches Interesse beanspruchen kann.

Bei allen Einwänden, die man gegen Einzelheiten des Buches haben kann, muß man ihm doch bescheinigen, daß es außer ihm kein Lehrbuch der Theoretischen Organischen Chemie auf vergleichbarem Niveau gibt.

Werner Kutzelnigg [NB 859]

Die Wiedergabe von Gebrauchsnamen, Handelsnamen, Warenbezeichnungen und dgl. in dieser Zeitschrift berechtigt nicht zu der Annahme, daß solche Namen ohne weiteres von jedermann benutzt werden dürfen. Vielmehr handelt es sich häufig um gesetzlich geschützte eingetragene Warenzeichen, auch wenn sie nicht eigens als solche gekennzeichnet sind.

Redaktion: 6900 Heidelberg 1, Ziegelhäuser Landstraße 35; Ruf: (06221) 45075; Fernschreiber 461855 kemia d.

© Verlag Chemie, GmbH, Weinheim/Bergstr. 1970. Printed in Germany.

Das ausschließliche Recht der Vervielfältigung und Verbreitung des Inhalts dieser Zeitschrift sowie seine Verwendung für fremdsprachige Ausgaben behält sich der Verlag vor. — Nach dem am 1. Januar 1966 in Kraft getretenen Urheberrechtsgesetz der Bundesrepublik Deutschland ist für die fotomechanische, xerographische oder in sonstiger Weise bewirkte Anfertigung von Vervielfältigungen der in dieser Zeitschrift erschienenen Beiträge zum eigenen Gebrauch eine Vergütung zu bezahlen, wenn die Vervielfältigung gewerblichen Zwecken dient. Die Vergütung ist nach Maßgabe des zwischen dem Börsenverein des Deutschen Buchhandels e. V. in Frankfurt/M. und dem Bundesverband der Deutschen Industrie in Köln abgeschlossenen Rahmenabkommens vom 14. 6. 1958 und 1. 1. 1961 zu entrichten. Die Weitergabe von Vervielfältigungen, gleichgültig zu welchem Zweck sie hergestellt werden, ist eine Urheberrechtsverletzung.

Verantwortlich für den wissenschaftlichen Inhalt: *Dipl.-Chem. Gerlinde Kruse*, Heidelberg. — Verantwortlich für den Anzeigenteil: *W. Thiel*. — Verlag Chemie GmbH (Geschäftsführer *Jürgen Kreuzhage* und *Hans Schermer*), 6940 Weinheim/Bergstr., Pappelallee 3 • Fernsprecher (06201) 3635, Fernschreiber 463516 vchwh d — Druck: *Druckerei Winter*, Heidelberg.