

oder Photoionisation, im vierten schließlich allgemeine Methoden zum Aufschließen durch chemische Reaktionen, beispielsweise mit Komplexbildnern, oder Säuren und das Schmelzen mit neutralen, sauren oder basischen Salzen; schließlich behandelt das fünfte und sechste Kapitel Aufschlußverfahren, bei denen Oxidations- oder Reduktionsprozesse ablaufen.

Das verdienstvolle Werk sollte in keinem analytischen Laboratorium fehlen; vielen Anorganikern und Organikern wird es Anregungen bei chemischen wie auch physikalischen Untersuchungen ihrer Substanzproben geben; bei Reinheitsprüfungen und Spurenkontrollen von technischen Produkten wird es ebenfalls gern zu Hilfe genommen werden.

Hermann Kienitz [NB 192]

MTP International Review of Science. Theoretical Chemistry.

Physical Chemistry, Series One. Vol. 1. Herausgeg. von *W. Byers Brown*. Butterworths, London/University Park Press, Baltimore 1972. 1. Aufl., 295 S., zahlr. Abb. und Tab., geb. £ 10.—.

Der MTP-Review ist ein ehrgeiziges Unternehmen, das für die Chemie zunächst in 33 Bänden einen enzyklopädischen Überblick über die Forschung der Jahre 1967–1971 geben will, der alle zwei Jahre durch eine neue Reihe ergänzt werden soll. Der vorliegende Band über die Theoretische Chemie umfaßt 41/2 Beiträge über quantenchemische Themen, 21/2 Beiträge über Gebiete der statistischen Thermodynamik und einen Übersichtsartikel über molekulare Streutheorie. Diese Aufteilung entspricht durchaus der derzeitigen Gewichtsverteilung innerhalb der Theoretischen Chemie. Alle Aufsätze enthalten ausgiebig Literaturhinweise (ca. 100 bis ca. 450 pro Beitrag), die im Text kritisch verarbeitet sind. Das macht diesen Band zu einer ausgesprochenen Fundgrube.

Die quantenmechanischen Beiträge befassen sich mit ab-initio-Rechnungen an Atomen (*J. I. Musher*), an zweiatomigen Molekülen (*A. C. Wahl*) und organischen Molekülen (*L. Radom* und *J. A. Pople*), bei letzteren im Rahmen der Hartree-Fock- (oder SCF)Näherung, bei Atomen und zweiatomigen Molekülen unter Einschluß der Elektronenkorrelation. Der Artikel von *Musher* ist etwas eigenwillig gehalten. *Wahl* weist mit Recht auf die Bedeutung der inzwischen erreichten Zuverlässigkeit quantenchemischer Rechnungen für einen engen Kontakt zwischen Experiment und Theorie hin. Im Beitrag über Eigenschaften von Molekülen geht *W. N. Lipscomb* auf Eigenschaften 2. Ordnung wie elektrische Polarisierbarkeit, diamagnetische Suszeptibilität und chemische Verschiebung an zweiatomigen Molekülen, berechnet mit der gekoppelten Hartree-Fock-Methode, ein. Andere Eigenschaften von Molekülen werden von *Wahl* sowie *Radom* und *Pople* besprochen. Die Artikel zur statistischen Thermodynamik beschäftigen sich vorwiegend mit Flüssigkeiten, und zwar mit deren Gleich-

gewichtstheorie (*D. D. Fitts*) und der Theorie der Transportvorgänge (*A. R. Allnatt* und *L. A. Rowley*). Vor allem im Beitrag von *Fitts* wird deutlich, welches Gewicht die Computer-Simulation (Molecular Dynamics und Monte-Carlo-Methode) in der gegenwärtigen Forschung hat.

Die Theorie der zwischenmolekularen Kräfte, über die *P. R. Certain* und *L. W. Bruch* referieren, kommt aus der Quantenchemie, wirkt aber wesentlich in die statistische Theorie hinein. Beide Gesichtspunkte werden gleichermaßen berücksichtigt. Im Artikel von *R. D. Levine* über die Theorie der molekularen Stöße werden vor allem die Voraussetzungen kritisch diskutiert, unter denen die vorgeschlagenen Methoden (klassisch und quantenmechanisch) gute und praktikable Näherungen sind.

Insgesamt kann man dem Herausgeber und seinem kompetenten Team und zu diesem Übersichtsband über neuere Entwicklung der Theoretischen Chemie nur gratulieren.

Werner Kutzelnigg [NB 185]

Neuerscheinungen

Die im folgenden angezeigten Bücher sind der Redaktion zugesandt worden. Nur für einen Teil dieser Werke können Rezensionen erscheinen, da die Seitenzahl, die für den Abdruck von Buchbesprechungen zur Verfügung steht, begrenzt ist.

Fundamental Aspects and Recent Developments in Optical

Rotatory Dispersion and Circular Dichroism. Herausgeg. von *F. Ciardelli* und *P. Salvadori*. Heyden & Son, London 1973. XVII, 419 S., geb. £ 11.00/DM 90.—.

Advances in Raman Spectroscopy, Vol. 1. Herausgeg. von *J. P. Mathieu*. Heyden & Son Ltd., London 1973. XII, 639 S., geb. 131.50.

Atlas of Thermoanalytical Curves 2. Herausgeg. von *G. Liptay*. Heyden and Son, London/Akadémiai Kiadó, Budapest 1973. 125 S., Ringbuch 94.50.

Unsere Umwelt als Lebensraum. Grzimeks Buch der Ökologie. Teil I: Die Umwelt der Tiere. Herausgeg. von *J. Illies*; Band II: Die Umwelt des Menschen. Herausgeg. von *W. Klausewitz*. Kindler Verlag, Zürich-München 1973. 744 S., geb. DM 138.—. Einzelausgabe des Sonderbandes "Ökologie" zu "Grzimeks Tierleben".

Angewandte Chemie, Fortsetzung der Zeitschrift „Die Chemie“

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: 694 Weinheim, Boschstraße 12; Telefon (06201) 40 36 und 40 37, Telex 465 516 vchwh d.

© Verlag Chemie GmbH, Weinheim/Bergstr. 1974. Printed in Germany.

All Rechte, insbesondere die der Übersetzung in fremde Sprachen, vorbehalten. Kein Teil dieser Zeitschrift darf ohne schriftliche Genehmigung des Verlages in irgendeiner Form – durch Photokopie, Mikrofilm oder irgendein anderes Verfahren – reproduziert oder in eine von Maschinen, insbesondere von Datenverarbeitungsmaschinen verwendbare Sprache übertragen oder übersetzt werden. All rights reserved (including those of translation into foreign languages). No part of this issue may be reproduced in any form – by photoprint, microfilm, or any other means – nor transmitted or translated into a machine language without the permission in writing of the publishers. – 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 gewerbllichen 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, Weinheim/Bergstr. – Verantwortlich für den Anzeigenteil: H. Both, Weinheim/Bergstr. – Verlag Chemie GmbH (Geschäftsführer Jürgen Kreuchhaar und Hans Schermer), 694 Weinheim/Bergstr. Pappelallee 3. Telefon (06201) 40 31. Telex 465 516 vchwh d – Satz, Druck und Bindung: Zechnersche Buchdruckerei, Speyer/Rhein.

Beilagenhinweis: Bitte beachten Sie die Beilagen der Firmen BIO-RAD Laboratories GmbH, München und Hannoversche Lebensversicherung A. G., Hannover