

von weniger als 15 s pyrolysiert. Zur Vermeidung der Rückreaktion werden die Spaltprodukte schnell unter solchen Bedingungen abgekühlt, daß das Isocyanat kondensiert, der Alkohol jedoch zu mindestens 95 % in der Dampfform zurückbleibt. [DOS 2410505; Air Products and Chemicals, Inc., Allentown, Pa. (USA)] [PR 248 -D]

Zur Herstellung von Schaumstoffen aus wäßriger Silicatlösung fügt man der Lösung Wasserstoffperoxid und ein Reduktionsmittel, z. B. Paraformaldehyd oder Hydrazin zu. Die Mischung schäumt unter beträchtlicher Wärmeentwicklung und wird hart. [DOS 2227640; Bayer AG, Leverkusen]

[PR 256]

NEUE BÜCHER

Mathematik für Naturwissenschaftler und Ingenieure. Band 1. Vektoren, Differential- und Integralrechnung. Von A. Jeffrey. Übersetzt von R. Janoschek. Verlag Chemie GmbH, Weinheim 1973. 1. Aufl., VIII, 385 S., 86 Abb., 18 Tab., kart. DM 39.—.

Das Buch entstand aus einer Einführungsvorlesung in Mathematik für Ingenieurstudenten, die etwa dem Stoff der Analysis I und II entspricht, wie er an deutschen Hochschulen gehalten wird. Die englische Originalausgabe ist einbändig; sie wurde bei der Übersetzung in zwei Bände aufgeteilt. Band 1 behandelt in 8 Kapiteln den Stoff der Analysis I, d. h. das Gebiet der Differential- und Integralrechnung. Kapitel 1 beginnt mit einer kurzen Einführung in die elementare Mengenlehre und schildert die Grundeigenschaften des reellen Zahlensystems unter Benutzung der modernen Kurzschreibweise. Nach dieser Konzeption an die modernen Strömungen in der heutigen Mathematik bleibt der Verfasser für den Rest des Buches im Rahmen der üblichen „klassischen“ Behandlungsweise der Analysis. Die drei folgenden Abschnitte befassen sich mit dem Funktionsbegriff, den Zahlenfolgen, den komplexen Zahlen und von hier überleitend mit der elementaren Vektorrechnung. Kapitel 5 behandelt die Differentiation einschließlich der partiellen Ableitungen. Nach einem gesonderten Kapitel über die Exponentialfunktion, die hyperbolischen Funktionen und den Logarithmus folgen zum Abschluß zwei Kapitel über die Integralrechnung mit ausführlicher Behandlung der Integrationsverfahren.

Bemerkenswert an diesem Buch ist, daß hier der – an sich seltene – Versuch gemacht wird, strenge mathematische Beweisführung mit rechen-technischem Üben zu vereinigen. Man muß dem Autor attestieren, daß ihm dieser Versuch in überzeugender und auch didaktisch geschickter Weise gelungen ist. Die mathematischen Beweise, die zu jeder wichtigen Aussage gegeben werden, sind einfach und durchsichtig und somit leicht verständlich. Außerdem enthält der Text eine Fülle von Beispielen mit ausführlicher Angabe des Lösungswegs, die es auch dem Anfänger leicht machen, die Handhabung mathematischer Formeln und Beziehungen „handwerklich“ zu erlernen. Hierzu tragen noch zahlreiche Übungsaufgaben am Ende eines jeden Kapitels bei, für die im Anhang Lösungshilfe gegeben wird. Beispiele und Übungsaufgaben sind, soweit möglich, naturwissenschaftlichen und technischen Gebieten entnommen, um den Anwendungsbereich des mathematischen Stoffes aufzuzeigen. Eine deutliche Aufgliederung des laufenden Textes in Definitionen, Lehrsätze und Beispiele erhöht die Übersichtlichkeit.

Das Buch ist allen Studierenden der naturwissenschaftlichen und technischen Disziplinen in den unteren Semestern – auch zum Selbststudium – sehr zu empfehlen.

Theo Ankel [NB 245]

Orbitale organischer Moleküle. Von W. L. Jorgensen und L. Salem. Übersetzt und bearbeitet von E. König. Verlag Chemie GmbH, Weinheim 1974. 1. Aufl., X, 294 S., 1180 Abb., geb. DM 32.—.

Die Autoren wenden sich mit diesem Buch (Originalausgabe: *The Organic Chemist's Book of Orbitals*, 1973) „an eine neue Generation von Chemikern, die bemüht ist, den Aufbau von Molekülen auf der Basis ihrer Elektronenstruktur zu verstehen“. Sie beginnen mit einer Einführung (44 Seiten) in die qualitative Konstruktion von σ - und π -Typ-Molekülorbitalen aus Gruppen- und Bindungs-Orbitalen, setzen dabei deren „Realität“ und praktische „Nützlichkeit“ voraus, fragen nach chemischen Anwendungen und verweisen auf weiterführende Literatur (76 Titel) auch zur Grenzorbital- sowie Relaxabilitäts-Methode.

Eindrucksvoll ist der Vergleich qualitativer Orbitale mit den auf 226 Seiten wiedergegebenen, von einer Rechenanlage perspektivisch gezeichneten Umrissen der Eigenfunktionen aus erweiterten Hückel- oder open-shell-MINDO/2-Rechnungen. Hohe Übersichtlichkeit wird durch Normierung, mehrfach vermiedenen Wechsel der Perspektive, sowie die Verwendung ausgezogener und gestrichelter Kontur-Linien erreicht. Eine geschickt gewählte Anordnung der sehr komplizierten Zeichnungen ermöglicht die Vereinigung der Orbitalsätze zu projektionfähigen Einzelbildern und ihre Ergänzung mit den tabellarisch vorangestellten Elektronenbesetzungen. Für alle Beispiele aus 104 Konformeren von 95 Molekülen (davon 14 ohne Kohlenstoff) mit 2 (Wasserstoff) bis 36 (Cyclohexan, Norbornadien) Valenzelektronen werden Details zu den Rechnungen gegeben und neue Molekülgeometrien zitiert. Abgesehen von vier Fällen sind jeweils alle mit Elektronen besetzten sowie einige unbesetzte (im Mittel 2.4) Orbitale abgebildet, gruppentheoretisch und soweit sinnvoll auch nach dem Orbitaltyp bezeichnet sowie bekannten ab-initio-Orbitalenergien zugeordnet. Hierbei wird in Kauf genommen, daß sich die verschiedenen Rechenverfahren auch bezüglich der geometrischen Parameter unterscheiden können. Schon dies sollte nahelegen, die so definierten Orbitalreihenfolgen mit Ergebnissen oder Interpretationen der Photoelektronen-Spektroskopie zu vergleichen.

Ungeachtet einiger Unklarheiten der Übersetzung und einiger unglücklicher Begriffsbildungen (z. B. „Äthyl-Radikal, halbiert“ oder „Benzol, Dewar-Form“) eignet sich das Buch vorzüglich zur Veranschaulichung semiempirischer Wellenfunktionen im quantenchemischen Unterricht.

Gerd Kaupp [NB 244]

Absorption Spectroscopy of Organic Molecules. Von V. M. Parikh. Addison-Wesley Publication Company, Reading 1974. 1. Aufl., X, 325 S., geb. £ 9.25.

Seit dem Eindringen moderner spektroskopischer Methoden in alle Teil-Disziplinen der Chemie und damit auch in die