

Zusammengefaßt: Ein guter Spektrenatlas, dessen Anschaffung empfohlen werden kann und der insbesondere für Laboratorien, die beginnen, eine PAC-Analytik aufzubauen, von Nutzen sein wird. Was das Vorkommen und die biologische Aktivität der PACs anbelangt, kann der Band die Literatursichtung erleichtern, aber keinesfalls ersetzen.

M. Zander [NB 725]
Rütgerswerke AG, Castrop-Rauxel

Vibronic Coupling. Von G. Fischer. Academic Press, London 1984. VIII, 222 S., geb. \$ 42.00. – ISBN 0-12-257240-8

In den letzten Jahren ist die Bedeutung der vibronischen Kopplung, das heißt der Wechselwirkung zwischen Elektronen- und Kernbewegung in Molekülen, für Spektroskopie und viele dynamische Prozesse immer klarer hervorgetreten, was sich in einer zunehmenden Zahl von Publikationen zu diesem Thema niederschlägt. Daher besteht lebhaftes Interesse an einem Buch, das den aktuellen Stand der Forschung auf diesem Gebiet dokumentiert und auch dem Nicht-Fachmann Orientierungshilfen gibt.

Die vorliegende Monographie wendet sich in erster Linie an den Nicht-Fachmann. Sie beginnt daher in Kapitel 1 mit einer elementaren Demonstration der Variablentrennung in verschiedenen Systemen, die das Verständnis der adiabatischen Näherung erleichtern soll. In den beiden folgenden Kapiteln wird diese Näherung für zwei- bzw. mehratomige Moleküle abgehandelt. Neben Varianten dieser Näherung kommen hier (hauptsächlich störungstheoretische) Methoden zur Sprache, darüber hinauszugehen und somit „intensity borrowing“ oder nichtadiabatische Effekte zu beschreiben. Zwei Zugänge zur Berechnung von Übergangsintensitäten in Elektronenspektren („dipole length“- und „dipole velocity“-Form) werden in Kapitel 4 verglichen. Kapitel 5 beschließt den allgemeinen Teil mit der Darstellung symmetriebedingter Entartungen (Jahn-Teller- und Renner-Teller-Effekt), zwei klassischen Beispielen für vibronische Kopplung. In den Kapiteln 6–8 kommen die wichtigsten Anwendungen zur Sprache: die Berechnung vibronischer Kopplungseffekte mit semiempirischen (CNDO) Methoden sowie Manifestation und Nachweis dieser Effekte in Elektronenspektren und Mehrphotonenprozessen. Wichtige dynamische Prozesse, bei denen die vibronische Kopplung eine Rolle spielt – insbesondere der strahlungslose Zerfall –, werden in Kapitel 9 besprochen; das Buch endet mit einem Überblick über die analogen Effekte in Molekulkristallen.

Insgesamt wird bei der Lektüre des Buches das Bemühen des Autors erkennbar, die vielfältigen Anwendungen der vibronischen Kopplung in einer Weise, die auch für den Nicht-Fachmann verständlich ist, aufzuzeigen. Aus mehreren Gründen kann dieses Bemühen dennoch nicht als geglückt gelten.

An erster Stelle müssen hier Stoffauswahl und -gliederung genannt werden. Wichtige neuere Entwicklungen, z. B. das Konzept der sogenannten diabatischen elektronischen Wellenfunktionen, das Auftreten starker nichtadiabatischer Effekte bei konischen Durchschneidungen von Potentialflächen und die Berechnung vibronischer Kopplungseffekte mit echten ab-initio-Methoden werden nicht einmal erwähnt, während Probleme wie lokale Moden, Energietransfer und unimolekulare Reaktionen, die mit dem Thema des Buches nur sehr lose zusammenhängen, diskutiert werden. Außerdem fehlen viele Standard-Literaturzitate, und es wird nur wenig experimentelles Material gebracht, um die Bedeutung der diskutierten Effekte zu belegen.

Der Stoff ist nicht gerade übersichtlich gegliedert. So werden die grundlegenden gekoppelten Gleichungen für Elektronen- und Kernbewegung in den Kapiteln 2, 3 und 5 und die sogenannte Herzberg-Teller-Entwicklung des Übergangsmomentes in den Kapiteln 3, 4 und 6 jeweils neu abgeleitet. Ohne Querverweise sind solche Wiederholungen nicht nur überflüssig, sondern erschweren sogar – zumindest dem Anfänger – die Orientierung. Die Zuordnung des Stoffes zu den Kapiteln ist teilweise unlogisch; Kapitel 7 z. B. wirkt wie ein Fremdkörper, der thematisch zu Kapitel 6 oder 8 gehört. Die unsystematische Anordnung des Stoffes erschwert es außerordentlich, sich einen Überblick über die Auswirkungen vibronischer Kopplung und deren inneren Zusammenhang zu verschaffen. Warum wird z. B. in Kapitel 5 über den Jahn-Teller-Effekt nicht die Gelegenheit genutzt, durch Diskussion von berechneten Modell-Spektren deren Zusammenhang mit adiabatischen Potentialflächen transparent zu machen? Insgesamt vermittelt das Buch den (allerdings unzutreffenden) Eindruck, man könne nichtadiabatische Effekte fast immer störungstheoretisch beschreiben, und es bleibt z. B. unverständlich, weshalb in Abschnitt 6.5 „Breakdown of the Born-Oppenheimer approximation“ ein Beispiel gebracht wird, bei dem diese gerade *nicht* zusammenbricht.

Das Bild der Mängelliste wird abgerundet durch zahlreiche kleinere Nachlässigkeiten und Fehler, die sich in den Text eingeschlichen haben. Als Beispiele seien erwähnt eine falsche Definition des Begriffes „electrical anharmonicity“ auf S. 106 oder (gravierender) auf S. 84 die Diskussion der Potentialflächen eines vibronischen Systems mit mehreren Kernschwingungen, bei der die eigentlich interessanten Vielmoden-Effekte schlicht übersehen werden.

Fazit: ein Buch, das nur sehr bedingt geeignet ist, einen Anfänger in das behandelte Gebiet einzuführen.

Horst Köppel [NB 721]
Physikalisch-chemisches Institut
der Universität Heidelberg

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: Pappelallee 3, D-6940 Weinheim,
Telefon (06201) 602315, Telex 465516 vchw d, Telefax (06201) 602328.

© VCH Verlagsgesellschaft mbH, D-6940 Weinheim, 1986
Printed in the Federal Republic of Germany.

Verantwortlich für den wissenschaftlichen Inhalt: Dr. Peter Göltz, Weinheim.

VCH Verlagsgesellschaft mbH (Geschäftsführer: Prof. Dr. Helmut Grunewald und Hans Dirk Köhler), Pappelallee 3, D-6940 Weinheim, Telefon (06201) 602-0, Telex 465516 vchw d, Telefax (06201) 602328. – Anzeigenleitung: Rainer J. Roth, Weinheim.

Satz, Druck und Bindung: Zehnersche Buchdruckerei, Speyer/Rhein.



Die Auflage und die Verbreitung wird von der IVW kontrolliert.

Alle 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. – Von einzelnen Beiträgen oder Teilen von ihnen dürfen nur einzelne Vervielfältigungstücke für den persönlichen und sonstigen eigenen Gebrauch hergestellt werden. Die Weitergabe von Vervielfältigungen, gleichgültig zu welchem Zweck sie hergestellt werden, ist eine Urheberrechtsverletzung.

Valid for users in the USA: The appearance of the code at the bottom of the first page of an article in this journal (serial) indicates the copyright owner's consent that copies of the article may be made for personal or internal use, or for the personal or internal use of specific clients. This consent is given on the condition, however, that the copier pay the stated per-copy fee through the Copyright Clearance Center, Inc., for copying beyond that permitted by Sections 107 or 108 of the U.S. Copyright Law. This consent does not extend to other kinds of copying, such as copying for general distribution, for advertising or promotional purposes, for creating new collective works, or for resale. For copying from back volumes of this journal see 'Permissions to Photo-Copy: Publisher's Fee List' of the CCC.