

stentin „geschmückt“ – zum Verständnis beiträgt, wird wohl das Geheimnis des Autors bleiben.

Beispiele für Ungenauigkeiten, die sich jedoch in Grenzen halten: Die Chlorophyll-Formel (S. 1040) ist falsch – wie übrigens auch im „Streitwieser/Heathcock“. Enantiomerenreine Aminosäuren sind nicht nur durch Racematspaltung und enzymatisch (S. 1240f.), sondern selbstverständlich auch durch enantioselektive Synthese zugänglich. Die 95proz. photochemische Umsetzung des Norbornadiens (S. 594) bedarf eines Sensibilisators, das sollte erwähnt werden. Bei der schönen Photoreaktion in Matrixisolationstechnik (S. 1164) hätte man besser ein Ausgangsmaterial formulieren sollen, aus dem bei der Bestrahlung kein das entstehende Cyclobutadien komplexierendes CO₂ freigesetzt wird. Oder sind das nur Spitzfindigkeiten? Aus dem Streben nach Vollständigkeit resultieren zuweilen kaum kommentierte Formeldarstellungen komplexer Reaktionen wie etwa die von Squalen zum Steroidsystem (S. 492) oder die der Biolumineszenz (S. 329/330); das ist des Guten zuviel und für den Lernenden kaum nachvollziehbar.

Die Einteilung einiger Kapitel und die gewählten Überschriften bedürfen eines Kommentars: Es ist schon kurios, wenn Kapitel 2 überschrieben ist mit „Molecules Lacking Functional Groups“ und wenn dann das anschließende Unterkapitel die funktionelle Gruppe definiert. In der Überschrift des Kapitels 17 werden Carbonsäuren mit der Einführung der keinesfalls auf Carbonsäuren begrenzten IR-Spektroskopie, in der des Kapitels 18 werden Derivate der Carbonsäuren mit der ebenfalls allgemeinen Einführung der Massenspektrometrie zusammengepreßt. Sicher wären diese spektroskopischen Methoden im der NMR-Spektroskopie vorbehaltenen Kapitel 10 besser aufgehoben. Da verfängt auch das Argument nicht „...at strategic points throughout the book, the important spectroscopic techniques ... are introduced.“ Es wird nämlich kaum einen Leser geben, der (selbst) dieses Buch wie einen Krimi, beginnend mit Seite 1 bis zur Seite 1275 verschlingt.

Was kommt in einem Werk dieses Umfangs zu kurz? Bei der Beschreibung der electrocyclic Reaktionen wird zwar auf *conrotatorische* und *disrotatorische* Bewegungen verwiesen; es wird aber lediglich als „curious“ apostrophiert, daß die Stereochemie korrespondierender photochemischer und thermischer Reaktionen entgegengesetzt ist; Orbitalsymmetrie-Vorstellungen werden nicht erklärt, sondern es wird auf die weiterführende Literatur verwiesen. Die Beschreibung der Aromatizität im Hückel-Bild ist recht unübersichtlich und wirkt lustlos verstreut. Wünschenswert wäre die Einbindung der für den Organiker doch so hilfreichen mnemotechnischen Verfahren von *Frost/Musulin* (für Hückel-Arene) und von *Zimmermann* (für Möbius-Arene) gewesen. Im gleichen Atemzug muß jedoch die detaillierte Behandlung der aromatischen Substitution und der spektroskopischen Charakteristika der Aromatizität (UV, IR, NMR) als besonders gelungen hervorgehoben werden. Aus der Sicht des Organikers hätte man sich über die erfreuliche und angemessene Berücksichtigung der Naturstoffchemie hinaus auch die Erörterung biochemischer Fragestellungen (Photosynthese, Atmungskette) gewünscht. Dies nicht nur, weil solche Materie heute zum Prüfungsstoff gehört, sondern insbesondere auch, weil das Fach Organische Chemie künftig die Biochemie (wieder) viel stärker einbinden sollte.

Wünsche nach Erweiterungen müssen fairerweise mit Streichungsvorschlägen einhergehen: Vermutlich mit dem Ziel, auch Nebenfächler anzusprechen oder auch wegen des anders strukturierten amerikanischen Bildungssystems beginnen einige Kapitel auf einem erstaunlich niedrigen Niveau (Beispiele finden sich in der Stereochemie oder bei

der Einführung der NMR-Spektroskopie: „...discrete spin packets ... which are also called quanta of energy“), erreichen aber bald das richtige Maß an Tiefgang. Hier wie auch durch Verzicht auf manch' Allgemeine Chemie könnte durch Anheben des Eingangsniveaus gekürzt werden, denn dieses Buch ist nach Anspruch, Inhalt und Umfang ohnehin für Nebenfächler ungeeignet.

Neben diesen kritischen Anmerkungen, die zum Teil auch Ansichtssache sein mögen, nun noch zwei Ärgernisse: 1) Es ist völlig unverständlich, warum in einem grundsätzlich neuen und schließlich für die 90er Jahre geschriebenen Lehrbuch nicht konsequent die seit Anfang der 70er Jahre etablierten SI-Einheiten (z. B. kJ/mol anstelle von kcal/mol) verwendet werden. In manchen Monographien wird es heute schon für überflüssig gehalten, die kcal/mol-Einheit überhaupt noch in Klammern hinter die kJ/mol zu setzen, was aber wohl immer noch angezeigt ist, da die ältere Generation sicherlich weiter in kcal denkt. 2) Nur kovalente Bindungen in Strichform, „einsame Elektronenpaare“ jedoch als Doppelpunkte darzustellen, ist zumindest in der Organischen Chemie unüblich^[1] und auch unbegründet, da auch diese Elektronen spingepaart sind. Punkte für Elektronen wirken mitunter geradezu störend, siehe z. B. die Formeln der 1,2-Diketone auf S. 1008 oben (S. 16: „The writing of electron-dot structures can be cumbersome ...“ ist im Text zwar anders gemeint, dennoch: wie wahr!).

Die angesprochenen Kritikpunkte sollen den ausgezeichneten Gesamteindruck dieses Werkes nicht schmälern, sondern Denkanstöße für eine spätere Neuauflage sein. Es verdient die Note *ausgezeichnet*, und wenn ein neues Lehrbuch nur dann eine Existenzberechtigung hat, wenn es besser ist als alle Vorgänger, dann ist der „Vollhardt“ nach Ansicht des Rezensenten diesem Ziel sehr nahe! Man wünscht diesem Lehrbuch eine möglichst schnelle Übersetzung ins Deutsche, auch wenn man vom heutigen Chemiker/Chemiestudenten angemessene Englischkenntnisse erwarten darf. Mit dem „Vollhardt“ kommt der Student auf vielen Gebieten über das Vordiplom hinaus bis zum Diplom.

Harry Kurreck [NB 895]
Institut für Organische Chemie
der Freien Universität Berlin

PS: „Study guide“, „solutions manual“ und Overhead-Folien waren leider noch nicht verfügbar.

[¹] Anmerkung der Redaktion: Nicht in der ANGEWANDTE CHEMIE: Um Verwechslungen mit negativen Ladungen zu vermeiden, werden auch in dieser Zeitschrift einsame Elektronenpaare als Doppelpunkte wiedergegeben – ein Punkt, der allerdings immer wieder für Diskussionen sorgt.

Solid-State Chemistry: Techniques. Herausgegeben von A. K. Cheetham und P. Day. Clarendon Press, Oxford 1987. XIV, 393 S., geb. £ 35.00. – ISBN 0-19-855165-7
Der erste Band („Techniques“) einer auf zwei Bände angelegten Beschreibung (Band 2 „Compounds“ ist geplant) des „Faches“ Solid State Chemistry ist nun erschienen. Das Werk, herausgegeben von zwei Experten aus Oxford, will eine Lücke füllen. Es wendet sich an „final-year undergraduates“ und „first-year graduates“, die sich zum ersten Mal mit der Festkörperchemie auseinandersetzen. Für (bundes-)deutsche Verhältnisse, den Willen zu einer (Grund-)Ausbildung in der Festkörperchemie vorausgesetzt, gehört das Werk wohl in die Hände des Fortgeschrit-

tenen kurz vor dem Hauptexamen oder des Diplomanden, der sich in „sein“ Spezialgebiet einarbeiten möchte. Aber auch zur Vorbereitung von Vorlesungen kann es wertvolle Dienste leisten, und es gehört ebenso in die Hände eines jeden Nicht-Festkörper-Chemikers zur Information und Fortbildung. Kurz: Es sollte in keiner Bibliothek fehlen.

Der erste Band gibt einen Überblick über die Methoden der Festkörperchemie. Er beginnt mit einem Kapitel über „Synthesis of solid-state materials“ (Autor: J. D. Corbett), immerhin 38 von 393 Seiten (10%). Das ist wohl tuend und läßt einen Lernprozeß erkennen, der ca. 15 Jahre nach H. Schäfers Appell in dieser Zeitschrift, doch den präparativen Aspekt der Feststoffchemie mehr zu beachten^[1], nun auch in Buchform Früchte trägt. Dieses Kapitel macht deutlich, daß die präparativ arbeitenden Festkörperchemiker – fast ein Pleonasmus! – viel besser sind als ihr Ruf als Pulvermischer und Bäcker.

Es folgen, fast möchte man sagen: die unvermeidlichen Kapitel über die *physikalischen* Methoden, deren sich der Festkörperchemiker bedienen muß, um seine Stoffe zu charakterisieren: Diffraction methods (A. K. Cheetham), X-ray photoelectron spectroscopy and related methods (G. K. Wertheim), Magnetic measurements (W. E. Hatfield), Optical techniques (R. G. Denning), High-resolution solid-state MAS NMR investigations of inorganic systems (C. A. Fyfe und R. E. Wasylshen), Computational techniques and simulation of crystal structures (C. R. A. Catlow), Transport measurements (A. Hamnett) und Vibrational spectroscopy (D. M. Adams). Das Buch schließt ab mit einem Kapitel von A. Navrotsky über „Thermodynamic aspects of inorganic solid-state chemistry“.

Das Register ist mit nur vier Seiten zwar ein wenig schmal geraten, aber da das Buch ja keine Enzyklopädie sein will, sondern eher ein Lehrbuch, ist das zu verschmerzen. Daß alle Autoren dem angelsächsischen Sprachraum entstammen, hat sicher die sprachliche Redaktion erleichtert. Sollte aber nicht zu der Ansicht verleiten, daß andersorts Festkörperchemie nicht auf höchstem Niveau betrieben würde und zu beschreiben wäre.

Alles in allem: Ein unentbehrliches Buch. Der Rezensent fiebert der Lektüre des zweiten, wegen des angekündigten Inhalts („Compounds“) für ihn interessanteren Bandes entgegen.

Gerd Meyer [NB 886]

Institut für Anorganische und Analytische Chemie
der Universität Gießen

[*] H. Schäfers: Zur Situation der präparativen Feststoffchemie (*Angew. Chem.* 83 (1971) 35; *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* 10 (1971) 43).

Quantenchemie. Von H.-H. Schmidtke. VCH Verlagsgesellschaft, Weinheim 1987. X, 297 S., geb. DM 58.00. – ISBN 3-527-26568-6

Bei der Ankündigung dieses Buches denkt man unwillkürlich: „schon wieder ein Buch über Quantenchemie.“ Es ist aus einer Vorlesung entstanden, die der Autor seit mehreren Jahren an der Universität Düsseldorf für Chemiestudenten gehalten hat. Dabei hat sich der Autor eingehend mit dem immer wieder auftretenden Problem befaßt, einen akzeptablen Kompromiß zwischen wissenschaftlich strenger Fundierung der Quantentheorie und den leider beschränkten mathematischen Kenntnissen fast aller Chemiestudenten in Deutschland zu finden. Dieses Problem scheint in dem vorliegenden Buch nahezu ideal gelöst zu sein. Es werden beim Leser nur mäßige mathematische Kenntnisse vorausgesetzt, um die grundlegenden quanten-

chemischen Methoden und Verfahren zu verstehen, aber es wird darauf hingewiesen, daß aktive Forschungstätigkeit auf diesem Gebiet das Studium weiterführender Werke erfordert. Entsprechende Literatur wird in den einzelnen Abschnitten angegeben.

Es läßt sich darüber diskutieren, ob die im Kapitel 2 recht ausführlich (ca. zehn Seiten) behandelten Bohrschen Postulate zum Verständnis der Quantentheorie beitragen. Die Postulate der Quantenmechanik, die für das Verständnis sicherlich ungleich wichtiger sind, werden auf nur sechs Seiten axiomatisch vorgestellt. Dabei werden die Bedeutung und der elementare Umgang mit Operatoren eingeführt, und zwar in so angenehm leicht verständlicher Form, die einen Chemiestudenten nicht schon nach wenigen Seiten verzagen läßt.

In Kapitel 4 werden beispielhaft einige Einkörperprobleme behandelt, Teilchen im Kasten, Wasserstoffatom und Harmonischer Oszillator. Wünschenswert wäre in diesem Zusammenhang auch die Behandlung des starren zweiatomigen Rotators, die bei den vorhandenen Vorkenntnissen nur ein bis zwei Seiten erfordern würde.

Sehr gut verständlich werden in Kapitel 5 die in der Quantenchemie wichtigsten Näherungsverfahren, die Störungs- und Variationsrechnung, dargestellt und verglichen. Da im folgenden Kapitel die Spinoperatoren eingeführt werden, wäre als Beispiel die Anwendung der Variationsrechnung auf die Berechnung von Spinsystemen höherer Ordnung ohne viel Aufwand möglich. Wenn man die Bedeutung der NMR-Spektroskopie für den Chemiker und das gerade auf diesem Gebiet häufig sehr lückenhafte Verständnis bedenkt, wäre diese Ergänzung sehr wünschenswert.

Im Kapitel 7 werden die für Mehrelektronensysteme (Atome) wichtigen Grundlagen, die Slater-Theorie und das Hartree-Fock-SCF-Verfahren, ausführlich beschrieben; anschließend wird relativ kurz das Prinzip der ab-initio-Rechnungen mit den dabei üblichen Basisfunktionen behandelt. In diesem Zusammenhang werden auch das Problem der Elektronenkorrelation und die möglichen Lösungsvorschläge ohne mathematische Einzelheiten, aber gut verständlich, angesprochen. Die Erweiterung auf Moleküle erfolgt im Kapitel 8 und anhand des H_2^+ -Ions und H_2 -Moleküls wird das Prinzip der chemischen Bindung erläutert. Recht ausführlich werden dann in Kapitel 9 die Valenzbindungs- und Molekülorbitaltheorie besprochen und auf deren Äquivalenz hingewiesen.

In den letzten drei Kapiteln werden die verschiedenen semiempirischen Verfahren ausführlich (nahezu 90 Seiten) beschrieben, die Näherungen für π -Elektronensysteme (Hückel und Pariser-Parr-Pople), für alle Valenzelektronen (Extended-Hückel, CNDO, INDO, MINDO, NDDO, MNDO) und die Ligandenfeldtheorie. Dabei werden in jedem Fall die entsprechenden Vernachlässigungen und ihre möglichen Konsequenzen sehr klar herausgestellt. Gerade die Hückel-Theorie spielt für das Verständnis der π -Elektronensysteme in der Organischen Chemie eine wichtige Rolle, aber die verschiedenen semiempirischen Verfahren mit allen Valenzelektronen haben mit zunehmender Leistungsfähigkeit der Computer in den letzten Jahren stark an Bedeutung verloren und werden in den kommenden Jahren wohl weitgehend von ab-initio-Rechnungen abgelöst werden. Unter diesem Gesichtspunkt erscheint dieser Abschnitt (Kapitel 11) etwas zu ausführlich, besonders wenn man bedenkt, daß die Anwendung von ab-initio-Rechnungen auf Moleküle nur sehr kurz abgehandelt wird.

Zusammenfassend muß man sagen, daß die voreilige Reaktion „schon wieder ein Buch über Quantenchemie“