

mulierung „die Wirkung des Katalysators beruhe auf der Verminderung der Aktivierungsenergie der katalysierten Reaktion“ nicht auszurotten zu sein. Unter dem Stichwort „Kohlevergasung“ werden sechs Reaktionsgleichungen angeboten, von denen nur vier linear unabhängig sind. Bei der „Reaktionsordnung“ gehen Molekularität und Ordnung durcheinander.

Druck und Bindung sind sehr gut, Druckfehler sind äußerst selten (die Bayard-Alpert-Röhre wurde zu Bayara-Alpert, in die „Chemiesorption“ hat sich ein zusätzliches eingeschlichen). Das Buch enthält eine Fülle von interessanten Angaben. Der Rezendent hat mit großem Vergnügen darin geblättert und gelesen. Die zuvor geäußerte Kritik soll nicht den Eindruck hervorrufen, das Lexikon enthielte eine Fülle falscher oder irreführender Formulierungen. Nur – wie soll der im Vorwort genannte Kreis der Adressaten, Praktiker und technisch orientierte Wissenschaftler, Lehrende und in der Ausbildung Begriffene, Beamte der Gewerbeaufsicht und Angehörige von Berufsgenossenschaften, Spreu von Weizen trennen? Deshalb kann sich der Rezendent nicht zu einer Empfehlung des Buches durchringen.

Hans-Günther Lintz [NB 957]

Institut für Chemische Verfahrenstechnik
der Universität Karlsruhe

Intermolecular Complexes. (Studies in Physical and Theoretical Chemistry, Vol. 52). Von *P. Hobza* und *R. Zahradník*. Elsevier, Amsterdam 1988. 308 S., geb. Hfl. 245.00. – ISBN 0-444-98943-9.

Die experimentelle und theoretische Untersuchung zwischenmolekularer Komplexe nimmt in der Physikalischen Chemie einen immer größeren Raum ein, und viele spezialisierte Übersichtsartikel wurden in den letzten Jahren veröffentlicht. Die Autoren des vorliegenden Bandes haben sich der Mühe unterzogen, einen umfassenderen Überblick über die neueren Entwicklungen auf dem Gebiet der zwischenmolekularen Wechselwirkung zu geben.

Nach einem kurzen Einleitungskapitel, in dem der Rahmen dieses Buches abgesteckt, die grundlegenden Züge der intermolekularen Wechselwirkung rekapituliert und auf frühere Gesamtdarstellungen zu diesem Thema hingewiesen

wird, folgt eine Diskussion der theoretischen Ansätze und der gegenwärtig routinemäßig verwendeten numerischen Verfahren zur Berechnung zwischenmolekularer Wechselwirkungen. Der Bogen spannt sich hierbei von „Configuration Interaction“ (CI)- und störungstheoretischen Methoden über „Self Consistent Field“ (SCF)- bis hin zu den vollständig empirischen Verfahren. Detaillierte Ableitungen werden nicht geboten. Die notwendigen Formalismen werden im wesentlichen als bekannt vorausgesetzt. Hingegen werden die Anwendungsmöglichkeiten aber auch die Grenzen der jeweiligen Verfahren anhand repräsentativer Beispiele aus der Literatur illustriert. Das dritte Kapitel besteht aus einer sehr kurzen Zusammenfassung der experimentellen Methoden.

Die beiden letzten Kapitel bieten einerseits eine detaillierte und systematische Übersicht über quantenchemische Rechnungen und über experimentelle Resultate zur Struktur und spektroskopischen Eigenschaften von isolierten Dimeren (von Edelgas-Dimeren über diverse H-Brücken-Komplexe bis zum G-C-Basenpaar), andererseits eine interessante Zusammenstellung von biochemisch relevanten Problemen, bei denen van-der-Waals-Komplexe eine entscheidende Rolle spielen. Bei dieser thematischen Breite ist es verständlich, daß viele Probleme oft nur angerissen werden und die Auswahl der diskutierten Systeme und auch der angewendeten Rechenverfahren merklich durch die Interessen der beiden auf dem Gebiet der ab-initio-Berechnungen tätigen Autoren determiniert ist. Das schmälert den Wert dieses Buches aber keineswegs, im Gegenteil: Es ist klar und verständlich geschrieben, und mit über 1200 Zitaten wird ein umfangreicher und fairer Überblick über die Literatur geboten – bedauerlicherweise nur bis 1984.

Als Unterlage für Vorlesungen und zum Einstieg in die Problematik ist dieses Buch allen Chemikern sehr zu empfehlen. Für die auf dem Gebiet der zwischenmolekularen Wechselwirkung, insbesondere den H-Brücken tätigen Wissenschaftler ist dieser Band eine Pflichtlektüre und aufgrund der zahlreichen tabellarisch zusammengestellten Daten und des Literaturverzeichnisses ein überaus nützliches Nachschlagewerk.

Alfred Karpfen [NB 960]

Institut für Theoretische Chemie
und Strahlenchemie
der Universität Wien (Österreich)

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.

© VCH Verlagsgesellschaft mbH, D-6940 Weinheim, 1989

Printed in the Federal Republic of Germany

VCH Verlagsgesellschaft mbH

Pappelallee 3, D-6940 Weinheim

Telefon (06201) 602-0, Telex 465 516 vchwh d, Telefax (06201) 6023 28

Geschäftsführer: *Hans Dirk Köhler*

Verantwortlich für den wissenschaftlichen Inhalt: *Dr. Peter Gölitz*

Anzeigenleitung: *Rainer J. Roth*



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 photostat, 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 Vervielfältigungsstücke für den persönlichen und sonstigen eigenen Gebrauch hergestellt werden. Die Weitergabe von Vervielfältigungen, gleichgültig zu welchem Zweck sie hergestellt werden, ist eine Urheberrechtsverletzung.

Der Inhalt dieses Heftes wurde sorgfältig erarbeitet. Dennoch übernehmen Autoren, Herausgeber und Verlag für die Richtigkeit von Angaben, Hinweisen und Ratschlägen sowie für eventuelle Druckfehler keine Haftung. – This journal was carefully produced in all its parts. Nevertheless, authors, editor and publisher do not warrant the information contained therein to be free of errors. Readers are advised to keep in mind that statements, data, illustrations, procedural details or other items may inadvertently be inaccurate.

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 percopy 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 a 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.