

Computational Chemistry. An Emphasis on Practical Calculations (Reihe: Studies in Physical and Theoretical Chemistry, Vol. 56). Von M. D. Johnston. Elsevier, Amsterdam 1988. XVIII, 680 S., geb. Hfl 245.00, Paperback Dfl 245.00. – ISBN 0-444-42962-X/0-444-42963-8

Offenbar ist dies Buch ein ausgearbeitetes Skriptum zu einem Einführungs-Kurs in die Datenverarbeitung für Chemiestudenten. Der Inhalt umfaßt in didaktisch geschickter Reihenfolge: 1) grundlegende Aspekte und Begriffe der elektronischen Datenverarbeitung mit Schweregewicht auf Personal-Computern (Algorithmen, strukturiertes Programmieren, Benutzerfreundlichkeit, Sortierverfahren, Textverarbeitung, Tabellenbearbeitung, Datenbanken, Rechner und Netzwerke, sinnvolle PC-Grundausrüstung, Programmiersprachen); 2) eine Reihe von anwendungsbezogenen Rezepten aus dem Bereich der analytischen und numerischen Mathematik (Zerlegung von rationalen Ausdrücken; Horner-Schema; nützliche Formeln für das Differenzieren und für Winkelfunktionen; komplexe Zahlen; Matrizen, Determinanten, Vektoren, lineare Gleichungssysteme); 3) die Programmierung numerischer und graphischer Probleme aus der Chemie in BASIC (2D- und 3D-Funktionsgraphen, Konturplots, einfache Molekülgraphik, einige spezielle Funktionen, Nullstellensuche, numerisches Differenzieren und Integrieren, Monte-Carlo-Integration, Matrix-Routinen, Diagonalisieren, Differentialgleichungen, Kurvenanpassung, Regression, Minimierung); sowie 4) eine größere Anzahl kleinerer und umfangreicherer, für den Chemiker nützlicher Programme (bis zu 2000 Zeilen Länge, unter anderem ein Molekül-Zeichen-Programm, ein Plot-Paket, ein Matrix-Paket, Simplex-Minimierung, schnelle Fourier-Transformation, Titrations-Kurven, NMR-Spektren-Simulation). Jeder Abschnitt wird mit Verständnisfragen und einigen Übungen abgeschlossen.

Der Text ist recht flüssig, um nicht zu sagen locker formuliert, so wie man eben in einer Vorlesung redet, um das Interesse der Studenten wach zu halten. Dies ist am Anfang des Buches auch nötig, wo zum Teil recht langatmig allgemeine Gesichtspunkte in wenig gehaltvollen Sätzen dargelegt werden („textbooks are an invaluable source of basic information“; „select the best method for the problem at hand“; „write expressions so that it is best for the actual calculation“).

Die pädagogische Strategie besteht im Vorführen und Lernen durch Nachvollziehen und Selber-Machen. Der theoretische Hintergrund der vorgeführten Methoden oder der angegebenen Programme wird (teilweise unzureichend) im Nachhinein angedeutet. Dieser sehr pragmatische Ansatz sollte Theorie-abgeneigten Chemikern gefallen, ist aber nicht nach jedermanns Geschmack.

Der Autor betont, daß die effiziente Anwendung des Hilfsmittels „Computer“ und fertiger Programme etwas eigene Programmiererfahrung voraussetzt („If you can program, the computer is your servant; otherwise, you are the computer's slave“ ist aber etwas extrem formuliert). Programmiererfahrung gewinnt man sicher am besten im Durcharbeiten der guten exemplarischen Programm-Stücke. Das Abtippen vieler Seiten Code erscheint jedoch wenig sinnvoll. Hätte man dem Buch nicht eine Diskette beilegen können? Viele Formulierungen spiegeln zu stark den persönlichen Geschmack des Autors wider und erfordern distanziertes Lesen („FORTRAN is not suitable for use with microcomputers“; „In going from microcomputers (i.e. PCs) to minicomputers we gain little, if anything“; „the mouse is one of the silliest inventions which has ever captured the fancy of anyone“).

Das Buch enthält viel Nützliches für einen guten Anfängerkurs, allerdings nur wenig aus den Bereichen Datenbanken und Textverarbeitung. Das Buch ist übrigens mit einem sehr einfachen Textsystem geschrieben (keine Sonderzeichen, kein Blocksatz, keine Worttrennung); die Schreibmaschinenseiten sind nicht frei von Tippfehlern. Der damit verglichen horrende Preis wird von Studenten, an die sich dies Buch ja wohl richten wollte, sicher nicht geopfert. Vergleichbare Bücher sind zu wesentlich niedrigeren Preisen auf dem Markt.

W. H. Eugen Schwarz [NB 959]
Institut für Theoretische Chemie
der Universität-Gesamthochschule Siegen

Combination Effects in Chemical Carcinogenesis. Von D. Schmähl. VCH Verlagsgesellschaft, Weinheim/VCH Publishers, New York 1988. 279 S., geb., DM 128.00. – ISBN 3-527-26742-50/0-89573-670-5

In diesem schmalen, sorgfältig hergestellten Band werden neuere Arbeiten über Kombinationseffekte von Chemikalien bei der Carcinogenese von Mitarbeitern des Deutschen Krebsforschungszentrums zusammengefaßt. Einige Leser hätten sich verständlicherweise wohl einen vollständigen Überblick über das gesamte Arbeitsgebiet gewünscht, doch sollte man sich vor Augen halten, daß dies wegen der umfangreichen Literatur, der beträchtlichen Anzahl an zweifelhaften und nicht weiterführenden Informationen und der Notwendigkeit zur Konzentration auf die Art der Wechselwirkungen eine kaum zu bewältigende Aufgabe ist. Dieser Band ist ein guter Anfang, da eine umfangreiche Sammlung wichtiger Ergebnisse detailliert besprochen wird.

Über die Entstehung von Krebs sind in den letzten zwanzig Jahren viele Informationen zusammengetragen worden, die für das Verständnis der Wechselwirkungen von Chemikalien bei der Carcinogenese von großem Wert sind. Die Bedeutung der metabolischen Aktivierung und des Nutzens von Genotoxitätstests wird in eigenen Kapiteln recht ausführlich behandelt. Es fehlt dagegen ein Überblick über die Relevanz anderer Faktoren, z.B. des Zellwachstums, das durch hormonähnliche Effekte, Cytotoxizität mit anschließender Regeneration, immunotoxische Effekte, physiologische Pharmakokinetik oder Kooperation von Zelle zu Zelle ausgelöst werden kann. Das heißt, die meisten Themen werden unter dem Gesichtspunkt behandelt, was passiert, wenn zwei oder mehr Chemikalien bei der Bildung von Tumoren zusammenwirken, und nicht unter dem Gesichtspunkt, warum dies passiert. Einige für die Entwicklung dieses Arbeitsgebiets bemerkenswerte Beiträge werden übergegangen. Bei den Betrachtungen zur Bildung von Tumoren in der Mäusehaut fehlen beispielsweise die klassischen Arbeiten von Berenblum und Shubik, die für den zweistufigen Prozess Wechselwirkungen zwischen einer Vielzahl von Reagentien nachweisen. Ebenso werden die jüngsten Arbeiten von Slaga und von Kinsel nicht erwähnt; sie weisen darauf hin, daß die Entstehung dieser Tumoren möglicherweise drei Stadien umfaßt, von denen jedes durch eine andere Chemikalie ausgelöst wird. Wegen solcher Informationslücken ist das Buch eher für Wissenschaftler mit Erfahrungen auf dem Gebiet der chemischen Carcinogenese als für Studenten und Wissenschaftler mit geringerem Hintergrundwissen geeignet.

Die einzelnen Themen des vorliegenden Buches sind sehr gut ausgearbeitet, und bei den grundlegenden Ergebnissen wird eine Fülle von Tabellen und Abbildungen aufgeboten. Die vorgestellten Wechselwirkungen von Chemikalien sind von weitreichender Bedeutung für die Praxis und betreffen viele wichtige Bereiche der Umwelt des Menschen. So wer-

den beispielsweise folgende Themen ausführlich behandelt: experimentelle Untersuchungen über Kombinationseffekte bei der Auslösung von Lungenkrebs, der Einfluß von Alkohol, die gegenseitige Beeinflussung kleiner Konzentrationen potenter Carcinogene, die im selben Gewebe wirken, die Kombination von Carcinogenen und Nicht-Carcinogenen, Wechselwirkungen zwischen den Komponenten von Krebs-Chemotherapeutika, Wechselwirkungen zwischen den Komponenten des Zigarettenrauchs sowie der überaus wichtige Einfluß der Ernährung, wobei betont wird, daß die insgesamt aufgenommene Nahrungsmenge vermutlich wichtiger ist als die Menge an Fett.

Für den erfahrenen Wissenschaftler auf dem Gebiet der Carcinogenese wird sich dieses Buch vor allem wegen seiner Ausrichtung auf die Umwelt als wertvoll erweisen. Seine volle Wirkung würde es erzielen, wenn es eine Gruppe engagierter Wissenschaftler anregen könnte, die gesamte Literatur über Wechselwirkungen sinnvoll zu ordnen.

David B. Clayson [NB 940]

Bureau of Chemical Safety
Food Directorate, Health Protection Branch
Ottawa, Ontario (Kanada)

Angular Momentum: Understanding Spatial Aspects in Chemistry and Physics. Von R. N. Zare. Wiley, New York 1988. XI, 349 S., geb., \$ 39.95. – ISBN 0-471-85892-7

Das Buch von *Richard Zare* beruht auf den „Baker-Vorlesungen“, die er 1980 an der Cornell-Universität hielt, und auf Vorlesungen für Doktoranden der Stanford-Universität in den folgenden Jahren. Es ist eine Perle unter den schönen Büchern, die aus den traditionsreichen Baker-Vorlesungen im Laufe vieler Jahre entstanden und von denen wohl auch *Linus Paulings* „The Nature of the Chemical Bond“ und „Structure and Mechanism in Organic Chemistry“ (1953) von *C. K. Ingold* vielen Chemikern aus den frühen Jahren bekannt sein wird.

Ziel des Buches ist es, ein grundlegendes und detailliertes Verständnis für den Drehimpuls in Atom- und Molekülpolyphistik zu vermitteln. Es beginnt mit der Einführung von Drehimpulsoperatoren und -wellenfunktionen. Kapitel 2 behandelt die Kopplung zweier Drehimpulse und Clebsch-Gordan-Koeffizienten. Kapitel 3 enthält eine sehr ausführliche Behandlung von Transformationen durch Rotation, Kapitel 4 gibt knapp die Kopplungen von mehr als zwei Drehimpulsen (6 j und 9 j Symbole), Kapitel 5 Tensoroperatoren. Kapitel 6 behandelt schließlich Energieniveaus und Wellenfunktionen des starren Rotators. Im Anhang werden einige kleine Fortran-Programme für 3 j, 6 j und 9 j Symbole abgedruckt.

Das Buch ist von äußerster Klarheit und ein didaktisches Meisterwerk. Der Leser wird durch eine Vielzahl von detaillierten Aufgaben und Beispielen aus der Atom- und Molekülpolyphistik zum ernsthaften Durcharbeiten des Stoffes angeleitet und zu wirklichem, „praktischem“ Verständnis geführt. Hierin unterscheidet sich das Buch deutlich von den zahlreichen Werken, welche die Drehimpulstheorie mehr vom formal theoretischen Standpunkt aus behandeln. *Richard Zare* wendet sich nicht an den theoretischen Physiker, sondern an den Experimentator, den Spektroskopiker und Chemiker. Freilich, auch der Theoretiker würde aus den vielen Anwendungsbeispielen Gewinn ziehen. *Zare* entwickelt alle wichtigen Grundlagen, so daß sich das Buch hervorragend zum Selbststudium und als Begleitbuch für eine entsprechende Vorlesung eignet. Sehr knapp behandelt wird allerdings (aus der Sicht des Chemikers) der Kernspin.

Als Zusammenfassung sei hier aus dem Vorwort von „Angular Momentum“ ein Zitat angegeben: „This is not the first book on angular momentum theory, but it differs from others in the emphasis placed on making it a learning text for those with a minimum background in quantum mechanics. It also differs in the choice of examples that are drawn almost entirely from atomic and molecular phenomena. I believe that it is not possible to present this material too simply to anyone learning angular momentum theory for the first time. Consequently, many intermediate steps are left in the text, which, to the initiated, may appear inelegant, if not annoying. At the same time this text serves a secondary purpose of being a reference work; the vast majority of formulas needed to solve any problem in angular momentum theory are contained in this book“. Dem ist nur noch hinzuzufügen, daß das Buch Studenten und angehenden Forschern als Lehrbuch wärmstens empfohlen sei (bei einem sehr vernünftigen Preis!). Ich wünsche ihm viele Auflagen.

Martin Quack [NB 972]

Laboratorium für Physikalische Chemie
der Eidgenössischen Technischen Hochschule
Zürich (Schweiz)

Anorganische Chemie. Von E. Riedel. Verlag de Gruyter, Berlin 1988. XV, 849 S., geb. DM 98.00. – ISBN 3-11-010162-9

Das vorliegende Lehrbuch ist für das Grundstudium der Anorganischen Chemie bestimmt. Es ließe sich aufgrund seines didaktischen Aufbaus auch als Einführungswerk in die Chemie benutzen, geht aber im Stoffumfang über das Pensum eines Studiums der allgemeinen Grundlagen der Chemie hinaus.

Der Autor hatte das Terrain „Anorganisches Lehrbuch“ vorerkundet mit einem Werk „Allgemeine und Anorganische Chemie“, Verlag de Gruyter, nun in der 3. Auflage, Berlin 1985, mit dem vor allem der Chemiestudent im Nebenfach angesprochen werden sollte. Offensichtlich auf den guten Erfahrungen mit diesem Kompendium aufbauend, wurde nun durch Ausweitung und Vertiefung ein neues Begleitwerk für das Grundstudium der Anorganischen Chemie geschaffen. Der Autor bemerkt einleitend, daß vor allem auf Ausgewogenheit zwischen Theorie und Stoffschemie zu achten war. Wie noch zu erläutern sein wird, könnten jedoch unter modernen Gesichtspunkten in beiden Teilgebieten Akzente anders gesetzt und Ergänzungen vorgenommen werden.

Die Grundlagen der Chemie werden auf 348 Seiten in den drei Kapiteln „Atombau“, „Die chemische Bindung“ und „Die chemische Reaktion“ abgehandelt. Der Lehrstoff Kernchemie und Atombau wird sehr übersichtlich mit grafischer Unterstützung durch Zweifarbenindruck dargelegt. Der Abschnitt über die chemische Bindung wirkt anschaulich mit einem akzeptablen Kompromiß zwischen Quantität und Qualität. Reaktionen im wäßrigen Medium, die im sehr übersichtlichen Teil „Die chemische Reaktion“ betrachtet werden, sind sehr instruktiv beschrieben, gehören aber m. E. ergänzt durch weitere mechanistische Einblicke auf qualitativer Basis, z. B. Substitutionsreaktionen an Verbindungen von Hauptgruppenelementen, Additions-/Eliminierungsmechanismus und dynamische Prozesse (Pseudorotation, Elektronenübertragungsvorgänge nach Außer- oder Innersphären-Abläufen). An dieser Stelle wäre es angebracht, darauf zu verweisen, daß die im stofflichen Teil des Buches des öfteren verwendeten „Lassoformulierungen“ bei Kondensationsreaktionen nur rein formal gelten und mechanistisch die oben erwähnte Addition/Eliminierung abläuft.