

in the metabolic activation of carcinogenic methylated polynuclear aromatic hydrocarbons – Estrogen carcinogenicity: hormonal, morphologic and chemical interactions – Theoretical implications of the k_e carcinogen-screening test – a microspectrofluorometric study of the cell's multiorganelle detoxification complex and intracellular carcinogen interactions.

Das Buch vermittelt den neuesten Stand des Wissens, da sämtliche Kapitel von anerkannten Spezialisten verfaßt wurden. Für eine rasche Publikation sorgte die Direktreproduktion der Originalmanuskripte. Daß mit diesem Publikationsverfahren die Wahrscheinlichkeit sinkt, von einem ordentlichen Stichwortverzeichnis profitieren zu können, beobachtet man auch hier: es ist nicht einmal vier Seiten lang. So fehlt *Aflatoxin* genauso wie *2-Aminofluoren*, um nur zwei Beispiele zu wählen. Man muß also das ausführliche Inhaltsverzeichnis sorgfältig durchlesen, bis man das gefunden hat, was einen interessiert, und das hätte man besser machen können! Trotz dieses Nachteils legen die Herausgeber eine Zusammenfassung vor, die jeder Chemiker besitzen sollte, der an der chemischen Carcinogenese interessiert ist – und das sollten immer mehr sein. Vielleicht werden dann solche Bücher auch billiger!

Gernot Boche [NB 977]

Fachbereich Chemie
der Universität Marburg

Theory and Methods of Calculation of Molecular Spectra.

Von *L. A. Gribov* und *W. J. Orville-Thomas*. Wiley, Chichester 1988. XXVII, 636 S., geb. £ 85.00. – ISBN 0-471-91882-2

Es ist zur Zeit angebracht und wünschenswert, ein umfassendes Buch über die Theorie von und Berechnungsmethoden für Molekülspektren zu schreiben. Die gute Aufmachung des hier besprochenen Buches, sein allgemeiner Titel und sein Umfang (über 600 Seiten) wecken somit die Erwartungen des potentiellen Lesers. Eine kleine Enttäuschung stellt sich bei der Feststellung ein, daß das Buch sich im wesentlichen auf die Diskussion der traditionelleren Arten von Spektroskopien (IR, Raman und Schwingungsanregung bei elektronischen Übergängen) konzentriert.

Bezüglich der Vibration von Molekülen ist das Buch sehr ausführlich und spricht interessante Gebiete und Probleme an. So wird die kinetische Energie der Schwingungsbewegung – innere Rotationen eingeschlossen – im Detail und mit viel Einsatz behandelt. Die für Schwingungen mit großer Amplitude geeignete Form der kinetischen Energie wird je nach Problemstellung sukzessive durch die Einführung der relevanten Approximationen vereinfacht. Die Normalkoordinatenanalyse und die Behandlung der Anharmonizitäten inklusive Vorschläge für computergerechte numerische Verfahren und Beispiele nehmen einen angemessenen Teil des Buches ein. Je ein Kapitel ist der Theorie der Intensitäten der Infrarot- und Raman-Spektren gewidmet.

Von besonderem Interesse erscheint mir das oft im Buch angesprochene „inverse spektrale Problem“. Aus experimentellen Spektren soll Information über das Molekül und seine physikalischen Eigenschaften gewonnen werden. Die Autoren beschreiben Modelle, die sie stufenweise erweitern, um die gemessenen Spektren mit wachsender Genauigkeit simulieren zu können.

Einige Kapitel des Buches beschäftigen sich mit der Theorie von und den Rechenmethoden für elektronische Zustände. Diese Kapitel werden bei dem zentralen Thema der Mo-

lekülschwingungen kaum gebraucht und wirken im Buch wie ein Fremdkörper. Sie sind zu lang, um nur einen Überblick zu bieten, zugleich aber nicht ausführlich und konsequent genug geschrieben, um das Erlernen der Materie zu ermöglichen. Zu diesem Thema existieren bereits viele Bücher.

Obwohl in einigen Teilen sehr ausführlich, ist das vorliegende Buch für Studenten als Lehrbuch ungeeignet. Wesentliche Teile sind nur mit Hilfe von Ergänzungsliteratur nachvollziehbar, und viele Referenzen sind nur auf Russisch erhältlich. Es fällt auf, daß modernere Literatur westlicher Autoren selten zitiert wird, und ich stelle mit Befremden fest, daß exzessiv Eigenzitate benutzt werden (etwa 25%). Drei besonders auffällige Beispiele seien hier erwähnt: Kapitel 9, 12 und 15. Kapitel 9 „The potential function of a polyatomic molecule and its properties“ enthält, trotz der wesentlichen Fortschritte auf diesem Gebiet (die auch in Lehrbüchern dokumentiert sind), Zitate westlicher Autoren nur bis 1971. Kapitel 12 „Characteristic vibrations of polyatomic molecules“ beginnt mit einem Eigenzitat und enthält nur zwei Zitate. Die insgesamt nur drei Zitate des Kapitels 15 über das wichtige und oft diskutierte Thema der Raman-Intensitäten bestehen aus zwei Eigenzitaten und einem Zitat einer Arbeit von *W. Heitler* aus dem Jahr 1954.

Da das vorliegende Buch viele interessante und wichtige Probleme anspricht und den für eine präzise und trotzdem leicht lesbare Darstellung nötigen Umfang hat, möchte ich meine Enttäuschung über das Resultat zum Ausdruck bringen. Die Diskussionen und Herleitungen sind oft länglich und trotzdem nicht leicht verständlich, die Zitierweise ist ärgerlich, die Nomenklatur ist stellenweise etwas unglücklich ausgefallen (z. B. die üblichen Wilsons-G- und F-Matrizen wurden umbenannt), und gewisse moderne Konzepte, z. B. lokale Moden und Vibrations in kurzlebigen elektronischen Zuständen, werden nicht diskutiert. In ihrem Vorwort heißen die Autoren Kritik willkommen. Ich hoffe, die hier geäußerte Kritik wird als konstruktiv betrachtet.

Lorenz S. Cederbaum [NB 976]
Physikalisch-chemisches Institut
der Universität Heidelberg

Art in Organic Synthesis. 2. Aufl. Von *N. Anand, J. S. Bindra* und *S. Ranganathan*. Wiley, Chichester 1988. XIX, 427 S., geb. £ 34.50. – ISBN 0-471-88738-2

„There is excitement, adventure, and challenge, and there can be great art, in organic synthesis.“ Es war die erklärte Absicht der Autoren, dieses Woodward-Zitat in der 1970 erschienenen Erstauflage von „Art in Organic Synthesis“ anhand einer Auswahl bemerkenswerter Synthesen zu illustrieren. Die seit damals erfolgte rasante Entwicklung neuer Ziele, Methoden und Reagentien forderte eine Überarbeitung dieser Dokumentation des „State of the Art“.

Die nun vorliegende zweite Auflage vom selben Autorenteam in einem anderen Verlag präsentiert wiederum unter knapp 100 Titeln ein buntes Kaleidoskop der Leistungsfähigkeit der Organischen Synthese. In Form kommentierter Fließschemata finden sich Zusammenfassungen bedeutender Synthesen aus dem gesamten Spektrum der Disziplin in qualitativ ausgewogener Mischung: etwa zwei Drittel Naturstoffe, ein Drittel nicht-natürliche Verbindungen. Als Indiz für den Grad der Aktualisierung darf gelten, daß die Mehrzahl der Kapitel aus der ersten Auflage ausgetauscht wurde. Nur gut ein Drittel sind „klassische“ Lehrbeispiele, die nahezu unverändert übernommen wurden. Die Bandbreite reicht von so einfachen Strukturen wie Adamantan über diverse Steroide, Alkaloide und Antibiotica, spektakuläre Polycy-