

Buchbesprechungen werden auf Einladung der Redaktion geschrieben. Vorschläge für zu besprechende Bücher und für Rezessenten sind willkommen. Verlage sollten Buchankündigungen oder (besser) Bücher an folgende Adresse senden: Redaktion Angewandte Chemie, Postfach 101161, D-6940 Weinheim, Bundesrepublik Deutschland. Die Redaktion behält sich bei der Besprechung von Büchern, die unverlangt zur Rezension eingehen, eine Auswahl vor. Nicht rezensierte Bücher werden nicht zurückgesandt.

**Supramolekulare Chemie.** Von F. Vögtle, Teubner, Stuttgart 1989. 447 S., Broschur DM 42.00. - ISBN 3-519-03502-2

Das vorliegende Buch kommt dem - vor allem seit Verleihung des Nobelpreises an Pedersen, Lehn und Cram - steigenden Interesse an Supramolekularer Chemie entgegen. In zwölf Kapiteln (6 bis 135 Seiten) werden ältere und neuere Gebiete der Supramolekularen Chemie vorgestellt. Rein biochemische molekulare Erkennungsmechanismen sowie Membran- und Polymerchemie wurden weggelassen. Das Buch konzentriert sich auf die fast schon klassische Wirt/Gast-Chemie der Komplexierung von geladenen und ungeladenen Gästen durch Wirtmoleküle unterschiedlichster Struktur. Es behandelt aber auch Flüssigkristalle sowie Einschlußverbindungen im Festkörper in eigenen Kapiteln. Schließlich zeigen Abschnitte über organische Schalter, organische Leiter, molekulare Elektronik und lichtinduzierte Wasserspaltung die Zukunftsperspektiven der Supramolekularen Chemie auf.

Nach einem einleitenden Kapitel werden Wirtmoleküle für Kationen und Anionen (Kap. 2) vorgestellt. Nach einer intensiven Behandlung bipyridinhaltiger Moleküle werden im Unterkapitel 2.2 ausführlich die Unterschiede und Gemeinsamkeiten von offenkettigen Podanden, makrocyclischen Coronanden und makrobicyclischen Cryptanden diskutiert und die Vielfalt an Molekülen und Anwendungen (Phasentransferkatalyse, Analytik) präsentiert. Im Kapitel Podanden vermißt man jedoch das EDTA-Molekül. Nach einer ausführlichen Behandlung eisenkomplexierender Siderophore und Vorstellung einiger Cyclophan-Komplexe (Metallionenkomplexe; die Neutralkomplexe von Cyclophanen werden in Kap. 4 behandelt) beschließen die Catenane das 2. Kapitel.

Die Abschnitte bioanorganische und bioorganische Modellverbindungen, Kapitel 3 und 4, sind etwas willkürlich vom zweiten Kapitel abgetrennt und stellen Wirt/Gast-Komplexe unter einem anderen Blickwinkel zusammen (Stichwort: Enzymmodell). Beginnend mit der Chemie der Cyclodextrine werden vor allem die Bindung von neutralen Gastmolekülen, aber auch von Ionen, in Wirten wie Cyclophanen und Cryptophanen diskutiert. Kapitel 4 schließt mit der Beschreibung der Wirt/Gast-Chemie nicht-makrocyclischer molekulärer Pinzetten.

Den Einschlußverbindungen im Festkörper und ihrer Anwendung sind die Kapitel 5 und 6 gewidmet. Kapitel 7 beschreibt ausgehend von Azobenzolen molekulär schaltbare Systeme, Kapitel 8 behandelt sehr ausführlich flüssigkristal-

line Systeme - von den physikochemischen Grundlagen über die LCD-Anzeigen bis hin zu den neuesten Anwendungen in der Polymerchemie. Die recht kurz gehaltenen Kapitel über Tenside, Micellen, Vesikel (Kap. 9), organische Leiter (Kap. 10), molekulare Elektronik (Kap. 11) und lichtinduzierte Wasserspaltung (Kap. 12) schließen das Buch ab, indem sie neuere Entwicklungen und vor allem Konzepte der Supramolekularen Chemie vorstellen.

Die Einteilung in einzelne Bereiche ist bei einem solch neuen Gebiet wie der Supramolekularen Chemie sehr schwierig. Der Autor spricht die Problematik auch im Vorwort an. So erscheinen z. B. die photoaktiven Cryptanden (Kap. 2.2.2.6) bei den mehrkernigen Wirt/Gast-Komplexen (Kap. 2.2.2) deplaziert, ebenso wie die Zuordnung der Catenane (Kap. 2.5) zur Wirt/Gast-Chemie mit Kationen und Anionen (Kap. 2).

Exemplarisch und sehr ausführlich wird die Synthese einiger Wirtmoleküle und supramolekularer Strukturen behandelt, so z. B. Collets Cryptophane, Coreys Totalsynthese von Enterobactin, Schills Catenane und Sauvages Catenanden. Durch die (gewollte) Eigenständigkeit der einzelnen Kapitel kommt es leider zu Wiederholungen, z. B. die Enantiomeren-trennung von Cyclotrimeratrylen-Derivaten auf S. 173 und S. 217.

Nicht zuletzt dank 48 Seiten Literaturverweisen (bis 1988) stellt das Buch in weiten Bereichen einen guten Einstieg in unterschiedliche Bereiche der Supramolekularen Chemie dar, besonders auch in die Arbeitsgebiete des Autors. Jedoch sind die einzelnen Themen unterschiedlich stark mit Zitaten verschenkt. In Kapitel 2.2. existieren allein 94 Zitate zur Einführung, im gesamten Kapitel 6 gibt es dagegen nur einen einzigen Verweis. Positiv ist die gemeinsame Anordnung aller Zitate am Ende des Buches. Dennoch bleibt ein häufiges Suchen nicht aus, da in jedem Kapitel die Referenzen wieder bei [1] beginnen.

Während die meisten Abschnitte so geschrieben sind, daß sie mit Vordiplomwissen verstehtbar sind, geht Kapitel 2.3 sehr in die Tiefe, und Tabelle 1 enthält viele Abkürzungen, die ohne die Kenntnis der Originalliteratur nicht verständlich sind. Das Buch ist arm an Schreibfehlern, z. T. jedoch systematisch (z. B. Allcock zu Allcock). Auf S. 191 entsteht der Eindruck, Whitlock hätte seine Arbeiten erst nach 1985 begonnen. Modern ist die Verwendung der Begriffe Benzen und Toluol, dennoch findet die atm noch ihren Weg in dieses Buch (S. 271). Gut gelungen sind die einheitlichen, übersichtlichen Zeichnungen, eine besonders schwere Aufgabe bei den zum Teil sehr komplizierten, dreidimensionalen Strukturen.

Alle Erkenntnisse der Supramolekularen Chemie konnten natürlich nicht in diesem Buch Platz finden. So wird der eine oder andere Leser besonders gelungene Wirtstrukturen wie z. B. molecular boxes, collars oder belts vermissen. Auch der Synthese könnte noch ein Unterkapitel gewidmet werden, denn „Verdünnungsprinzip“ und „Templateeffekt“ gehen zwischen den Zeilen unter. Historisch ist das Buch auch erweiterungsfähig: die ersten makrocyclischen Polyether wurden bereits 30 Jahre vor Pedersen von Lüttringhaus publiziert, und auch die Chemie der Cyclam-Makrocyclen ist schon lange bekannt.

Etwas zu kurz kommen Reaktionen, auch katalytischer Art, die mit Supramolekularen Systemen durchführbar sind. Vielleicht könnte diesen Anwendungen in einer weiteren Auflage ein eigenes Kapitel gewidmet werden. Wünsche nach einer Auflage in englischer Sprache wurden auf der diesjährigen Tagung für Makrocyclische Chemie bereits laut.

Fazit: Ein sehr interessantes Buch über die verschiedensten Aspekte der Supramolekularen Chemie, sowohl als gute Einführung – wegen der ausführlichen Einleitungen in den einzelnen Kapiteln – und guter Ausgangspunkt zur Originalliteratur (48 Seiten Zitate), als auch als Quelle neuer Ideen, besonders in den letzten Kapiteln. Zwei Dinge ragen jedoch heraus: Das Buch ist in *deutscher Sprache* geschrieben, und jede Seite kostet weniger als zehn Pfennig!

*Ulrich Lüning* [NB 1009]

Institut für Organische Chemie  
und Biochemie der Universität Freiburg

**Ab Initio Calculation of the Structures and Properties of Molecules.** Von *C. E. Dykstra*. Elsevier, Amsterdam 1988. X, 275 S., geb. Hfl. 210.00.– ISBN 0-444-43013-X

Quantenchemische ab-initio-Verfahren sind dank der Entwicklung wirksamer Näherungen und enormer rechentechnischer Fortschritte zu einem gleichberechtigten Partner experimenteller Methoden bei der Bestimmung von Struktur und Eigenschaften von Molekülen in der Gasphase geworden. Für den Nicht-Spezialisten ist es jedoch schwer, die Glaubwürdigkeit und Zuverlässigkeit der Ergebnisse einer speziellen Rechnung einzuschätzen, obwohl die subtilen Faktoren, die die mit einer bestimmten Methode bei einem bestimmten Problem erreichbare Genauigkeit beeinflussen, in der Quantenchemie im allgemeinen gut verstanden sind. Der Autor stellt sich das verdienstvolle Ziel, dem Nicht-Spezialisten das für eine solche Beurteilung notwendige Wissen zu vermitteln und ihm einen Überblick über die Leistungsfähigkeit heutiger ab-initio-Methoden zu geben. Er steht dabei vor der schwierigen Aufgabe, die notwendigen methodischen Kenntnisse und die Terminologie in gedrängter Form zu vermitteln. *Dykstra* tut das mit der Autorität des erfahrenen Quantenchemikers in beschreibender Form (40 S., Kapitel 3). Ob diese auch für Nicht-Spezialisten informativ ist, muß das Urteil dieser Leser zeigen.

Im Kapitel 1 (10 S.) wird die Problematik der theoretischen Bestimmung von Molekülstrukturen an fünf Beispielen aus der Astrophysik demonstriert. Nach einer Darstellung des im Rahmen der Born-Oppenheimer-Approximation fundamentalen Konzeptes der Potentialfläche (und der Eigenschaftsfläche) bringt Kapitel 4 (21 S.) eine systematische Darstellung von ab-initio-Strukturen. Die Kapitel 6–8 sind den Molekülschwingungen (18 S.) sowie den elektrischen (44 S.) und magnetischen Eigenschaften (22 S.) gewidmet. Die 390 Zitate, die bis Anfang 1988 reichen, sind in Form einer Bibliographie alphabetisch geordnet und geben erfreulicherweise auch die Titel der zitierten Arbeiten an. Man findet auch ein Autoren- und ein Sachverzeichnis, das aber leider keine Auskunft über die Moleküle gibt, auf die im Buch Bezug genommen wird.

Die Zusammenstellung und die Diskussion von Ergebnissen ist nicht umfassend. Es werden fast ausschließlich Moleküle und Molekülkomplexe mit zwei oder drei Atomen der zweiten Periode und einigen H-Atomen behandelt („schweren“ Elementen werden nur zwei Seiten gewidmet). Dieser Einschränkung ist sich der Autor, der sich natürlicherweise primär auf Ergebnisse des eigenen Arbeitskreises stützt, bewußt. Unverständlich ist allerdings, warum weder früher erschienene Bücher zum gleichen Gegenstand wie die von *Hehre, Radom, Schleyer und Pople* (1986)<sup>[\*]</sup>, von *Mulliken* und *Ermler* (1981) sowie von *Carsky* und *Urban* (1980) noch

einschlägige Übersichtsartikel zitiert werden. Die speziellen Interessen des Autors erklären auch den relativ breiten Raum, den die etwas formalen Darstellungen der Rolle analytischer Ableitungen in der Quantenchemie (Kapitel 5, 26 S.) und der „Polymatrix Approach for SCF and Local Space SCF“ (11 S. im Kapitel 9) einnehmen.

Dieses Buch ist gut geschrieben und so gestaltet und produziert, daß man es gern zur Hand nimmt. Die Zahl der Druckfehler hält sich in Grenzen und diese sind nur gelegentlich sinnentstellend, z. B. wenn auf S. 118 aus „quartic“ „quadratic“ wird. Jedem Quantenchemiker wird dieser Band eine willkommene Zusammenstellung wichtiger Resultate sein. Der Nicht-Spezialist wird daneben jedoch noch andere Monographien, Übersichtsartikel und Originalarbeiten zu Rate ziehen müssen, um einen vollständigen und ausgewogenen Überblick über die Leistungsfähigkeit von ab-initio-Methoden und die bisher erzielten Ergebnisse zu erhalten, zumal über die Bewertung mancher Näherung (z. B. zur Berücksichtigung der Elektronenkorrelation bei der Strukturbestimmung) unter Quantenchemikern noch lange keine Einigkeit erzielt ist.

*Joachim Sauer* [NB 968]

Zentralinstitut für Physikalische Chemie  
der Akademie der Wissenschaften der DDR  
Berlin (DDR)

**Application of Pattern Recognition to Catalytic Research.**

Von *I. I. Ioffe*. Research Studies Press, Letchworth/Wiley, Chichester 1988. VIII, 185 S., geb. £ 30.50. – ISBN 0-86380-069-6/0-471-91907-1

Der Autor gibt in der vorliegenden Monographie einen Überblick über quantitative Methoden zur Optimierung von heterogenen Katalysatoren. Bei diesen unter dem Begriff „pattern recognition“ zusammengefaßten Methoden handelt es sich um den Versuch, Aktivität und Selektivität von Katalysatoren mit deren Zusammensetzung und Eigenschaften zu korrelieren. Eigenschaften wie beispielsweise spezifische Oberfläche und Dichte des Katalysators sowie Elektronenaffinität, erstes Ionisierungspotential und Ionenradius der Katalysatorelemente bestimmen neben vielen anderen in hohem Maße die Katalysatoraktivität. Da in vielen Fällen keine einfache lineare Beziehung zwischen diesen Eigenschaften und der Aktivität und Selektivität des Katalysators besteht, wird eine Auswertung mit Hilfe statistischer Methoden durchgeführt. Die hierfür erforderlichen Daten müssen entweder der Literatur entnommen oder experimentell bestimmt werden. Dabei ist es wichtig, daß für die untersuchte Reaktion eine große Zahl von Katalysatoren bewertet wird.

In einem ersten Schritt werden die Katalysatoren in drei Klassen mit hoher, mittlerer und geringer Selektivität eingeteilt und mit den jeweiligen spezifischen Eigenschaften korreliert. Anhand der häufigsten Eigenschaften können nun neue, noch nicht untersuchte Katalysatoren ebenfalls einer dieser drei Klassen zugeordnet werden. Ob die so vorgenommene Klassifizierung zutreffend ist, muß anschließend experimentell überprüft werden. Ziel der Untersuchungen ist, die Zahl der Experimente, die zur Beurteilung neuer Katalysatoren notwendig sind, durch eine geeignete Vorauswahl einzuschränken. Wie zuverlässig diese Klassifizierung ist und ob nicht ein aktiver Katalysator durch falsche Einteilung zu früh ausgeschlossen wird, hängt unter anderem von der Qualität der eingesetzten Daten und des verwendeten Rechenmodells ab. Dementsprechend nimmt die Diskussion der verschiedenen Modelle für heterogene Ein- und Mehrkompo-

[\*] Siehe *W. Kutzelnigg*, *Angew. Chem.* 100 (1988) 312; *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* 27 (1988) 862.