

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)^[*], 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.