

sen jüngste faszinierende Entwicklungen, während *Pfaltz* am Beispiel seiner vielversprechenden C_2 -symmetrischen Semicorrinkomplexe einen interessanten, detaillierten Einblick in die Entwicklungsarbeit, die für solche spektakulären Erfolge nötig ist, bietet.

Der letzte Beitrag des Buches beschreibt die Strukturen von Zeolithen und deren gezielte Modifikation und zeigt dann die Möglichkeiten für die organische Synthese auf, die allerdings bisher vor allem für die technische Produktion von Grundchemikalien genutzt werden.

Insgesamt ist das Buch ein äußerst nützlicher Führer zum zukunftssträchtigen Thema Katalysatoren in der organischen Synthese, der besonders Anfängern einen einfachen Einstieg in das Gebiet ermöglicht. Alle Artikel sind so kompetent und umfassend geschrieben, daß sie häufig zitiert werden dürfen. Man wird zur Zeit schwerlich andere Zusammenfassungen finden, die das aktuelle Wissen so konzentriert darbieten. Es ist nur zu hoffen, daß der wiederum gestiegene Preis von DM 78.00 – meines Erachtens zu hoch für ein Paperback-Buch – einer weiten Verbreitung des interessanten Werks auch unter Studenten nicht im Wege steht.

Hans-J. Altenbach [NB 1051]

Institut für Organische Chemie
der Universität-Gesamthochschule Paderborn

Fundamentals of Molecular Spectroscopy. Von W. S. Struve.
Wiley, Chichester 1989. 379 S., geb. £ 31.95. –
ISBN 0-471-85424-7

Eine gute Ausbildung in den Grundlagen der Molekülspektroskopie ist für alle Chemiker sowie für viele Physiker und Biologen von Bedeutung. Mehrere Generationen von jungen Naturwissenschaftlern sind mit dem dreibändigen „Klassiker“ Herzberg: *Molecular Spectra and Molecular Structure* (Erstausgabe des ersten Bandes 1939 auf Deutsch: *Molekülspektren und Molekülstruktur*, Steinkopff Verlag) aufgewachsen. Herzbergs Werk bleibt an Gründlichkeit und wissenschaftlichem Tiefgang unübertroffen. Durch die Vielzahl gut ausgewählter Beispiele und die klare, meist einfache Darstellung ist es außerdem ein pädagogisches Meisterwerk. Allerdings ist der dritte und letzte Band bereits 1966 erschienen und das Buch seitdem (abgesehen von einem ergänzenden Tabellenwerk, K. P. Huber, G. Herzberg: *Constants of Diatomic Molecules*, van Nostrand, 1979) nicht überarbeitet worden. Seit 1966 hat es jedoch eine enorme Entwicklung in der Molekülspktroskopie gegeben. Im experimentellen Bereich haben sich die Fourier-Transform- und die Laserspektroskopie durchgesetzt, im theoretischen Bereich sind quantitative quantenchemische Rechnungen möglich geworden. Diese Entwicklungen konnten damals bestenfalls erahnt werden. Dementsprechend gibt es schon seit einiger Zeit einen dringenden Bedarf an modernen Lehrbüchern der Molekülspktroskopie. Dieser ist zum Teil gedeckt worden, z. B. durch die Lehrbücher Kroto: *Molecular Rotation Spectra*, Wiley, 1975 und Hollas: *High Resolution Spectroscopy*, Butterworths, 1982, welche hier empfohlen werden können.

Das Buch von W. S. Struve ist aus Vorlesungen zwischen 1974 und 1987 auf dem amerikanischen „Graduate“-Niveau entstanden, entsprechend etwa den letzten Semestern des deutschen Diplomstudiengangs und der (leider meist vernachlässigten) Doktorandenausbildung durch Spezialvorlesungen. Es behandelt zunächst elementar Strahlungsübergänge, sodann Atomspektren (40 Seiten), zweiatomige Moleküle (90 Seiten), vielatomige Moleküle (100 Seiten) und in den abschließenden Kapiteln Linienformen und -stärken,

Laser, Zweiphotonenprozesse und nichtlineare Optik. Der Stoff wird in der Regel kompetent und didaktisch brauchbar abgehandelt. Insgesamt ist das Buch vergleichbar mit entsprechenden Kapiteln aus typischen Lehrbüchern der Physikalischen Chemie, geht aber darüber hinaus. Etwas enttäuschend ist das recht veraltete Material und die sehr unvollständige Berücksichtigung neuer Entwicklungen. So stammen etwa Beispiele für IR-Spektren von HCl aus den Jahren um 1960, und der Student wird sich anhand dieses Buches kaum adäquat über die Entwicklung z. B. der FTIR-Spektroskopie informieren können. Ebenso fehlen Hinweise auf die für die Theorie der Molekülspektren so wichtige Entwicklung der Molekülsymmetriegruppen durch Longuet-Higgins, Hougen und Watson, die schon in Band 3 des „Herzberg“ 1966 als Neuheit referiert wurde und worüber es schon seit nunmehr zehn Jahren ein Lehrbuch von P. R. Bunker gibt. Auch andere Entwicklungen der „Nach-Herzberg-Zeit“ wie die Watsonsche Theorie der Spektren asymmetrischer Kreisel und vieles mehr wird nicht einmal am Rande erwähnt. Andererseits werden neue Spezialtechniken (CARS und ähnliches) in Kapitel 11 des Buches abgehandelt.

Zusammenfassend läßt sich sagen, daß das Buch von W. Struve sicher für den Bücherschrank eines Dozenten, der entsprechende Vorlesungen vorbereitet, geeignet sein kann und in der Regel in größeren Instituts- und Abteilungsbibliotheken zur Verfügung stehen sollte.

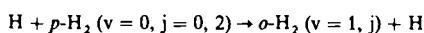
Martin Quack [NB 1054]

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

Bimolecular Collisions (Reihe: *Advances in Gas-Phase Photochemistry and Kinetics*). Herausgegeben von M. N. R. Ashfold und J. E. Baggott, VCH Verlagsgesellschaft, Weinheim 1989. XVII, 416 S., geb. £ 85.00. – ISBN 0-85186-393-0

Die Untersuchung bimolekularer Stoßprozesse auf molekularer Ebene konnte in den letzten Jahren, insbesondere durch die Entwicklung empfindlicher, zustandspezifischer, laserspektroskopischer Techniken, auf neue Gebiete ausgeweitet werden. Detaillierte Information zur Dynamik von chemischen Reaktionen und Energieübertragungsprozessen, aber auch zu Grenzgebieten wie dem Gas-Festkörper-Übergang in Metallclustern und dem Gas-Flüssigkeits-Übergang in Lösungsmittelclustern konnten auf einem Niveau gewonnen werden, das die Ergebnisse von ab-initio-Rechnungen überprüfbar macht.

Gleich das erste Kapitel ist ein schönes Beispiel für den erreichten Fortschritt. Valentini und Phillips zeigen, wie durch laserspektroskopische Techniken wie Resonante Mehrphotonenionisation und Kohärente Anti-Stokes-Raman-Streuung die klassische Wasserstoffaustauschreaktion $H + D_2 \rightarrow HD + D$ unter Einzelstoßbedingungen zustandspezifisch untersucht und Rotations- und Schwingungsanregung des H_2 -Produktmoleküls bei verschiedenen Stoßenergien gemessen werden können. Die erhaltenen Ergebnisse sind in beeindruckend guter Übereinstimmung mit ab initio berechneten Zustandsverteilungen. Neuere Messungen partieller Querschnitte der Reaktion zeigen für die Bildung von



$o-H_2 (v = 1, j)$ scharfe Maxima bei Stoßenergien, die nach quantendynamischen Rechnungen Schwingungsniveaus des linearen H_3 -Übergangszustandes entsprechen. Valentini

spricht hier von einem „Schwingungsspektrum des Übergangszustandes“.

Im Kapitel 2 beschreibt *Smith* den Einfluß der Reaktantenschwingungsanregung auf bimolekulare Reaktionen unter anderem wieder am Beispiel der Wasserstoffaustauschreaktion. Weitere Beispiele sind die Reaktionen von F-, O(³P)- und O(¹D)-Atomen mit H₂, O(³P) mit HCl und HBr, Reaktionen mit vier Atomen wie OH + H₂, OH + HBr, CN + HCl, OH + CO, Vierzentrenreaktionen und Radikal-Radikal-Reaktionen. Insbesondere für endotherme und direkte Reaktionen mit „späten“ Energiebarrieren werden drastische Reaktionsbeschleunigungen nach Schwingungsanregung erwartet und zum Teil gefunden. Die Übergangszustandstheorie mit der Annahme schwingungsmäßig adiabatischen Verhaltens zeigt sich dabei als wertvoller theoretischer Rahmen zum Verständnis der experimentell gefundenen Effekte.

Auch für die in Kapitel 3 von *Davies* und *Pilling* beschriebenen Assoziationsreaktionen H + C₂H₄ → C₂H₅, CH₃ + CH₃ → C₂H₆, CH₃ + H → CH₄, O + OH → HO₂, HO₂ + HO₂ → H₂O + O₂ bildet, wie in Kapitel 4 von *Hase* und *Wardlaw* beschrieben, die Übergangszustandstheorie der Kinetik den theoretischen Hintergrund. Da diese Reaktionen oft über Potentialtöpfe und nicht über Barrieren ablaufen, kann man die Lage des Übergangszustandes nicht an der Barriere festlegen, sondern muß zu alternativen Definitionen kommen.

Energieübertragung durch nichtreaktive Stöße werden in Kapitel 5 von *Hippler* und *Troe* behandelt. Experimentell werden hier die im Durchschnitt pro Stoß übertragene Energie (ΔE) und die Faktoren, die (ΔE) beeinflussen, gemessen. Die erhaltenen Werte können mit entsprechend gemittelten Werten aus quasiklassischen Trajektorienrechnungen und Quantenstreurechnungen verglichen werden. Insbesondere neuere experimentelle Techniken wie „heiße“ UV-Absorptionsspektroskopie, zeitaufgelöste IR-Mehrphotonenanregung und Mehrphotonenionisationsnachweis ermöglichen weitergehende Einblicke in die im Mittel übertragene Energie als Funktion des Anregungsgrades des Moleküls. Die meisten bisherigen Experimente mitteln über Sequenzen von Stößen, während zustandsspezifische Einzelstoßexperimente an hochangeregten mehratomigen Molekülen noch kaum durchgeführt worden sind. Solche Experimente würden einen noch direkteren Vergleich mit der Theorie erlauben.

In Kapitel 6 beschreiben *Husain* und *Robertis* laserspektroskopische Techniken, mit denen Erdalkalimetallatome in spezifische Zustände angeregt und ihr Verschwinden durch reaktive und inelastische Stöße zeitaufgelöst verfolgt werden können. Insbesondere Reaktionen mit Oxidantien sind oft von intensiver Chemilumineszenz begleitet, die zur Identifizierung der verschiedenen Reaktionskanäle herangezogen werden kann. Aus dem Vergleich mit den Ergebnissen von ab-initio-Rechnungen und mit adiabatischen Korrelationsdiagrammen lassen sich vielfach detaillierte Reaktionsmechanismen ableiten.

In Kapitel 7 behandelt *Jarrold* Darstellung, Nachweis und Reaktivität von Metallclustern. Dabei scheinen Cluster bestimmter Größe chemisch besonders inert zu sein. Recht wenig ist noch über den Einfluß von elektronischer und Molekülstruktur auf die Clusterreakтивität bekannt. Ziel der Untersuchungen ist ein tieferes Verständnis von Chemisorption und Katalyse auf molekularer Ebene.

In Kapitel 8 faßt *Leone* experimentelle und theoretische Ergebnisse zu bimolekularen Stoßprozessen von Ionen in Driftfeldern zusammen. Mit der Laserspektroskopie ist es inzwischen möglich, Zustandsverteilungen und räumliche Ausrichtung der Ionen detailliert zu messen. Eine entsprechend detaillierte Spektroskopie zur Untersuchung einfacher Ion-Molekül-Reaktionen scheint in Reichweite zu sein.

Das Buch ist eine kritische Würdigung einiger aktueller Forschungsgebiete der Kinetik und bietet viel Hintergrundmaterial. Bei den Gebieten, die mir näher bekannt sind, habe ich nichts vermißt und nichts als ungenau oder unzuverlässig empfunden. Bedauerlich ist, daß die umfangreichen Studien zur inelastischen und reaktiven Streuung in gekreuzten Molekularstrahlen kaum Erwähnung finden. Nachteilig ist auch der hohe Preis von DM 260.-. Insgesamt kann das Buch Chemikern, die sich für diese Spezialgebiete interessieren, empfohlen werden.

Karl Kleinermanns [NB 1041]
Physikalisch-chemisches Institut
der Universität Heidelberg

Patai's Guide to the Chemistry of Functional Groups. Von *S. Patai*. Wiley, Chichester 1989. 455 S., geb. £ 24.95.— ISBN 0-471-91256-2

Bis Ende 1988 sind 40 Titel in 59 Bänden mit über 700 Kapiteln auf über 43000 enggedruckten Seiten der bekannten Serie „The Chemistry of Functional Groups“ erschienen. Zur Veranschaulichung dieses beeindruckenden Umfangs ist der Herausgeber *S. Patai* in dem hier besprochenen Band „Patai's Guide to the Chemistry of Functional Groups“ neben der aufgestapelten Pyramide der von ihm herausgegebenen Bände abgebildet. Um den Inhalt dieser monumentalen Serie besser zugänglich zu machen, hat *Patai* die Anregung von *H. C. Brown* aufgegriffen und auf 455 Seiten eine Zusammenfassung und detaillierte inhaltliche Beschreibung des gesamten Werkes gegeben.

Der Inhalt der einzelnen Kapitel ist unter Angabe wichtiger Daten wie Seitenzahl, Zahl der Literaturzitate einschließlich des Zeitraums, aus dem sie stammen, Art von Tabellen oder Schemata etc. beschrieben. Dies geht über eine Zusammenstellung der Inhaltsverzeichnisse weit hinaus. *Patai* gibt auch inhaltlich die wichtigsten chemischen Ergebnisse wieder, die durch zahlreiche Formeln untermauert werden. Neben dem Autoren- und Sachverzeichnis sind zwei Arten von Querverweisen sehr nützlich: *Complementary* bezieht sich auf Beschreibungen *derselben* funktionellen Gruppe in anderen Bänden und *Relevant* auf ähnliche Reaktionstypen *anderer* funktioneller Gruppen.

Der Bedarf für eine derartige Zusammenfassung ergibt sich aus der Struktur des „Patai“: Überlappungen sind bei den in sich geschlossenen Kapiteln mit monographischem Charakter nicht zu vermeiden. Der vorliegende Band schafft hier Transparenz.

Karsten Krohn [NB 1061]
Institut für Organische Chemie der
Technischen Universität Braunschweig

The Logic of Chemical Synthesis. Von *E. J. Corey* und *Xue-Min Cheng*. Wiley, Chichester 1989. 436 S., geb. £ 19.15.— ISBN 0-471-50979-3

Die Bedeutung der Synthese für die Entwicklung der Organischen Chemie kann kaum überbewertet werden. Die Anzahl der synthetisierten Verbindungen, seien es Naturstoffe oder nicht in der Natur vorkommende Substanzen, hat in den letzten zwei Jahrzehnten explosionsartig zugenommen. Einer der Faktoren, der zu dieser rasanten Entwicklung beigetragen hat, ist die Formulierung von Konzepten zur rationalen Analyse von Syntheseproblemen. Dabei war die Ent-