

Buchbesprechungen werden auf Einladung der Redaktion geschrieben. Vorschläge für zu besprechende Bücher und für Rezensenten sind willkommen. Verlage sollten Buchankündigungen oder (besser) Bücher an folgende Adresse senden: Redaktion Angewandte Chemie, Postfach 1011 61, W-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.

Reviews in Computational Chemistry. Von K. B. Lipkowitz und D. B. Boyd. VCH Publishers, New York/VCH Verlagsgesellschaft, Weinheim 1990. XIX, 419 S., geb. DM 176.00 – ISBN 0-89573-754-X/3-527-27845-1

In der Einleitung bemühen sich die Herausgeber um eine Definition des Begriffes „Computational Chemistry“, der im Deutschen am ehesten, wenn auch nicht ganz treffend, mit „Computerchemie“ wiedergegeben werden kann. Nach der allgemeinsten der von ihnen angebotenen Begriffsbestimmungen werden darunter all jene Bereiche der chemischen Forschung verstanden, die durch den Einsatz von Computern entweder beschleunigt oder überhaupt erst ermöglicht werden. Nach dieser Definition dürfte es heutzutage kaum noch ein Teilgebiet der chemischen Forschung geben, das nicht mit der Computerchemie überlappt. Der vorliegende Band ist als Auftakt für eine Serie gedacht, in der in Übersichtsartikeln die Entwicklung aller Aspekte der Computerchemie einschließlich des „Molecular Modeling“ verfolgt werden soll. Um es vorweg zu nehmen: Es ist den Herausgebern gelungen, hervorragende Artikel über aktuelle Gebiete der Computeranwendung in der Chemie zu präsentieren.

Am Anfang und am Ende des Buches steht jeweils ein Kapitel aus dem Gebiet der ab-initio-Quantenchemie. D. Feller und E. R. Davidson referieren im ersten Kapitel („Basis Sets for Ab Initio Molecular Orbital Calculations and Intermolecular Interactions“) über Grundlagen und neuere Entwicklungen der Basissätze in quantenchemischen ab-initio-Rechnungen, inklusive eines Abschnitts „In-Depth Discussion“, der diesen Titel auch verdient. Hilfreich ist eine tabellarische Zusammenfassung der gängigen Polarisationsfunktionen, die man an anderer Stelle sonst kaum findet.

Im zweiten Kapitel werden von J. J. P. Stewart die semiempirischen Verfahren besprochen. Die in den letzten Jahren etwas verwirrende Entwicklung der aus der Dewar-Schule stammenden Methoden (MNDO, MND0C, AM1, PM3) werden in ihrer chronologischen Reihenfolge vorgestellt. Die theoretischen Grundlagen werden nur sehr kurz behandelt. Zu Recht verweist der Autor darauf, daß hierzu ein neuerer Übersichtsartikel von W. Thiel vorliegt und ein ähnliches Vorhaben nur auf eine Wiederholung hinausläufe – eine löbliche Selbstbeschränkung! Kleinere Ungenauigkeiten bei der Auflistung der Anwendungsbereiche der Methoden – auf S. 62 wird fälschlicherweise behauptet, daß es für MINDO/3 keine Parameter für die P-O-Bindung gibt – können den Wert des flüssig geschriebenen Artikels nicht schmälern. Der in tabellarischer Form gebotene detaillierte Über-

blick über die Durchschnittsfehler der drei wichtigsten Methoden MNDO, AM1 und PM3 für mehrere Stoffklassen ist eine große Hilfe für den potentiellen Anwender.

Im dritten Kapitel („Properties of Molecules by Direct Calculation“) gehen C. E. Dykstra, J. D. Augspurger, B. Kirtman und D. J. Malik der Frage nach, welche theoretischen Verfahren sich für die direkte, d. h. unmittelbar aus der Wellenfunktion durch Ableitung nach bestimmten Größen herleitende Berechnung eignen. Sie beschränken sich auf die Bestimmung von elektrischen, magnetischen und optischen Eigenschaften, Kraftkonstanten und Übergangswahrscheinlichkeiten: Lesenswert als Einführung und komprimierte Darstellung der mathematischen Grundlagen, aber die Diskussion der Ergebnisse gerät auf knapp neun Seiten zu kurz für ein solch umfangreiches Thema.

Vier Kapitel sind den Bereichen Molecular Modeling und quantitative Struktur-Wirkungs-Beziehung gewidmet. Dies ist bei der stürmischen Entwicklung dieser Gebiete und dem Mangel an Übersichtsartikeln verständlich und zu begrüßen. Typisch für dieses stark anwendungsorientierte Gebiet der Computerchemie ist auch, daß drei der vier Kapitel von Autoren aus der Industrie verfaßt wurden. D. B. Boyd führt im Kapitel 9 („Aspects of Molecular Modeling“) in dieses Gebiet ein und zeigt, wie der Nutzen der verschiedenen theoretischen Ansätze aus der Sicht des in der industriellen Praxis mit großen Molekülen konfrontierten Chemikers aussieht. Daß Molecular Modeling alles andere als eine „amateurhafte, verwässerte oder zufallsbehaftete Computerchemie“ (S. 321) ist, wird von E. L. Plummer im Kapitel 4 („The Application of Quantitative Design Strategies in Pesticide Discovery“) deutlich gemacht. In diesem ausführlichen Aufsatz (49 Seiten) wird die Anwendung der theoretischen Hilfsmittel, insbesondere der statistischen Verfahren, für die synthetischen und analytischen Strategien bei der Suche nach neuen Pestiziden unter modernen Randbedingungen (Ökologie) demonstriert. Daß für das realistische Modellieren von Eigenschaften großer Moleküle die dynamischen Eigenschaften berücksichtigt werden müssen, ist seit längerem bekannt. Die Entwicklung der drei wichtigsten Ansätze, Monte-Carlo-Verfahren, moleküldynamische Rechnungen und störungstheoretische Berechnung der freien Energie, wird von T. P. Lybrand im Kapitel 8 etwas kurz (25 Seiten) skizziert. Der Nutzen der Computerchemie wird im Kapitel 9 von D. B. Boyd am Beispiel von vier vermarkteten Verbindungen demonstriert, bei deren Entwicklung computerunterstützte Verfahren eine maßgebliche Rolle spielten.

Welche Bedeutung der Einsatz von Computern und der damit möglichen Verfahren der Multivariationsanalyse für die Analytische Chemie hat, wird von P. C. Jurs im Kapitel 5 (43 Seiten), „Chemometrics and Multivariate Analysis in Analytical Chemistry“) aufgezeigt. Auch dieses Kapitel kann im weiteren Sinne zum Bereich des Molecular Modelings gezählt werden, da die Anwendung schwerpunktmäßig im Bereich der Struktur-Wirkungs-Beziehungen biologisch aktiver Substanzen liegt.

Die Entwicklung der Computergraphik mit der Möglichkeit, dreidimensionale Strukturen schnell und bequem am Bildschirm darzustellen, hat für die Chemie eine enorme Bedeutung. Welchen Einfluß dies auf die Entwicklung von modernen Datenbanken hat, die ein schnelles Abfragen von Molekülstrukturen auf der Basis von gespeicherten dreidimensionalen Informationen gestattet, beschreiben Y. C. Martin, M. G. Bures, und P. Willet in Kapitel 6 (51 Seiten, „Searching Databases of Three-Dimensional Structures“). Während ältere Datenbanken wie etwa die Cambridge

Structural Database im wesentlichen als Archiv für Koordinaten benutzt werden, gestatten neuere Programme die gezielte Abfrage nach bestimmten Teilstrukturen. Der Hinweis auf vorhandene Programme und Bezugsquellen ergänzt den detaillierten Report.

Die Fortschritte in der Computergraphik haben auch wesentlich zur Entwicklung von Konzepten beigetragen, die die Moleküloberfläche ins Zentrum der Betrachtung stellen. *P. G. Mezey* referiert in Kapitel 7 (30 Seiten, „Molecular Surfaces“) über theoretische Modelle, bei denen Moleküleigenschaften mit der Oberflächenform korreliert werden. Hierzu gehört das von *M. L. Connolly* entwickelte Modell der lösungsmittelzugänglichen Oberflächen, das zu einem besseren Verständnis von Lösungsmittelleffekten bei Proteinen beigetragen hat. Der Artikel macht deutlich, wie dieses neue Konzept ohne die Entwicklung der Computergraphik kaum hätte entstehen können.

Das letzte Kapitel („Perspectives on Ab Initio Calculations“) von *E. R. Davidson* ist nicht der technischen Entwicklung von ab-initio-Verfahren gewidmet, sondern geht der Frage nach, was wir denn durch die Anwendung von ab-initio-Programmen lernen können und gelernt haben. Die persönliche Sicht des Autors wird in fünf Punkten kurz diskutiert und mit historischen Beispielen belegt, wobei die Überschrift des letzten Punktes sicherlich die Zustimmung aller findet: „Computers do not solve problems, people do.“

Das Buch wird ergänzt durch einen Überblick über Hardware und Software (und Bezugsquellen) auf dem Gebiet des Molecular Modelings von *D. B. Boyd*, wobei eine sowohl amüsante wie auch hilfreiche Checkliste mit Fragen vorangestellt wird, über die man vor dem Kauf von Programmen und Computern Klarheit haben sollte.

Die technische Qualität des Buches ist ausgezeichnet, die Zahl der Druckfehler hält sich in Grenzen, der Preis erscheint beim heute üblichen Preisniveau angemessen. Das Buch kann jedem empfohlen werden, der sich über den Entwicklungsstand der Computerchemie informieren will und über den Tellerrand seines eigenen Fachgebietes zu schauen gewillt ist. Der Spezialist muß selbst entscheiden, ob die ihn betreffenden Kapitel Neues bringen. Bibliotheken chemischer Institute wird die Anschaffung sehr empfohlen. Die Themenauswahl ist sicherlich subjektiv, kann aber als glücklich und der Entwicklung der Computerchemie entsprechend bezeichnet werden. Auf weitere Bände dieser Reihe in vielleicht zweijährigen Abständen ist zu hoffen, den Herausgebern kann zum ersten Band gratuliert werden.

Gernot Frenking [NB 1113]

Fachbereich Chemie
Universität Marburg

A Random Walk Through Fractal Dimensions. Von *B. H. Kaye*. VCH Verlagsgesellschaft, Weinheim/VCH Publishers, New York 1989. XXV, 421 S., geb. DM 138.00 (Brotschur DM 64.00). – ISBN 3-527-26468-X/ISBN 0-89573-496-6

Das von *Benoît B. Mandelbrot* entdeckte Gebiet der Fraktale verändert wegen seiner Bildhaftigkeit die Denkweise der Naturwissenschaften möglicherweise stärker als etwa der zweite Hauptsatz der Thermodynamik. Vermutlich auch wegen dieser Anschaulichkeit beschäftigen sich bereits viele Wissenschaftler mit diesem neuen Werkzeug. Literatur, die einen Überblick gewährt, ist daher willkommen. Das Buch von *Kaye* ist weder ein Handbuch noch ein Nachschlagewerk; es hält vielmehr genau das, was der Titel verspricht: einen ziellosen Spaziergang durch fraktale Dimensionen, be-

schränkt auf den naturwissenschaftlich-mathematischen Bereich. Der fraktale Rechenmechanismus ist ebenfalls ziellos, aber keineswegs planlos. Er enthält strenge Vorschriften über die Grundoperationen, die dann allerdings auf Zufallszahlen angewendet werden. Obwohl Fraktale letztlich zur Mathematik gehören, werden in dem Buch Formeln vermieden. Das geht leider so weit, daß auch keine mathematische Definition des Begriffes „Fraktal“ gebracht wird. Glanzstück: Das Kapitel „Mathematical Description of Fractal Clusters“ enthält nur zwei ganz nebensächliche Formeln. Die wenig präzisen Hinweise auf „berühmte“ Namen aus dem Fachgebiet im Text stören ein wenig; man muß in den Referenzen nachsuchen, um Genaueres zu erfahren.

Der Nutzen des Buches: Das reichlich bebilderte Werk ist frisch von der Leber weg geschrieben und – weil ohne mathematischen Ballast – sehr leicht lesbar. Als erste Einführung ist es daher sehr gut geeignet. Es ergänzt ferner grundlegende Werke, vor allem diejenigen von *Mandelbrot* (z. B.: Die fraktale Geometrie der Natur. Birkhäuser, Basel 1988) oder solche, die auf ein Gebiet spezialisiert sind. Es bringt eine Fülle neuer Beispiele aus der Mathematik, naturwissenschaftlichen Statistik und verschiedenen Gebieten der Naturwissenschaften. Der Schwerpunkt der Anwendungsbeispiele liegt im Fachgebiet des Autors, dem Bereich disperser Stoffe. Das Werk regt auch zu weiterer Forschung an.

Erich Robens [NB 1115]

Institut für Anorganische und Analytische Chemie
der Universität Mainz

Spectroscopy of Matrix Isolated Species. (Reihe: Advances in Spectroscopy, Vol. 17). Von *M. J. Almond* und *A. J. Downs*. Herausgegeben von *R. J. H. Clark* und *R. E. Hester*. Wiley, Chichester 1989. XIV, 511 S., geb. £ 111.00. – ISBN 0-471-92170-X

Fast jede neue Technik entwickelt sich nach einem typischen Schema: Auf die Pionierphase folgt eine stürmische Gründerzeit, in der man sich in einer Vielzahl von Laboratorien an die Grenzen des Verfahrens herantastet, gefolgt von einer weit ruhigeren Phase der Konsolidierung. Dann gehen die Gründungsväter in Pension, die Söhne sind etabliert, aber für die Enkel ist es eine Routinetechnik geworden.

Dies gilt auch für die Matrixisolierungsspektroskopie. Die Matrixtechnik ist zum Bestandteil der Lehrbücher geworden, Spezialisten aus aller Welt trafen sich schon zum siebten Male. Der Altmeister, *George Pimentel*, der in den letzten 35 Jahren mit bahnbrechenden Versuchen so viele beeinflusst und beeindruckt hat, starb viel zu früh 1989.

Das vorliegende Buch ist das siebzehnte in der Reihe „Advances in Infrared and Raman Spectroscopy“. Entgegen der Norm ist es nur einem Thema gewidmet, der Matrixspektroskopie, das von zwei britischen Autoren, *Matthew J. Almond* und *Anthony J. Downs*, auf 185 Seiten mit vielen Abbildungen abgehandelt wird. Zwei Drittel des 511 Seiten starken Buches enthalten eine tabellarische Zusammenfassung der zwischen 1977 und 1986 untersuchten Spezies sowie 60 Seiten mit 2250 Literaturhinweisen.

Wie so oft: Es ist das rechte Buch zur falschen Zeit. Wäre es 1987 erschienen oder auch Anfang 1988, so hätte allein schon die beeindruckende Fleißarbeit der Zusammenstellung der Bibliographie über manche Schwachstelle hinwegblicken lassen. Doch es erschien 1989. Im Jahr zuvor war von *David W. Ball* und Kollegen von der Rice University in Houston die hervorragende „Bibliography of Matrix Isolation Spectroscopy: 1954–1985“ (Rice University Press) publiziert worden, die auch als recherchierbare dBase-Datenbank