

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

erhältlich ist. Zwei Jahre zuvor hatte *Martin Moskovits* das Thema „Atome und kleine Cluster“ mit dem Buch „Metal Clusters“ (Wiley Interscience) abgedeckt, und vom gleichen Autor, zusammen mit *Lester Andrews*, erschien 1989 das Buch „Chemistry and Physics of Matrix-Isolated Species“ (North-Holland).

Im Vergleich mit diesen Werken können nun leider die Schwachstellen des vorliegenden Buches nicht übersehen werden; dem sachkundigen Leser erscheint es mehr als Flickenteppich denn als ein Werk aus einer Hand. Aber auch ein Flickenteppich hat seinen Reiz.

Die 14 Seiten des einleitenden Kapitels beleuchten die Geschichte der Matrixisolierung, wobei auf sieben Seiten Titel und Themen aller wesentlichen Bücher und Übersichtsartikel aufgeführt werden. Hier fällt ein Nachteil der computer-gestützten Literaturrecherche auf: Es wird so manche ob-skure Arbeit zitiert, aber es fehlt zum Beispiel jeder Hinweis auf das 1978 erschienene Buch „Cryochemistry“ von *Gleb B. Sergeev* und *Vladimir A. Batyuk* (Mir Verlag, Moskau), die „Bibel“ der sowjetischen Matrixspektroskopiker. Wie in vielen westlichen Übersichtsartikeln werden auch hier Ar-beiten aus dem Ostblock nur unvollständig zitiert.

Die experimentellen Methoden der Matrixspektroskopie haben sich seit den klassischen Büchern von *Moskovits/Ozin* und *Hallam* wenig geändert; im zweiten Kapitel wird daher in konzentrierter Form auf die Probleme und neueren Er-gebnisse relevanter spektroskopischer Techniken eingegangen. Eine dreiseitige Tabelle listet die wesentlichen Arbeiten noch einmal auf, eine Reihe großformatiger Abbildungen bringt dieses Kapitel auf 23 Seiten.

Probleme der Energieübertragung in Matrices werden im dritten Kapitel auf 17 Seiten abgehandelt, wobei mehrere ganzseitige Abbildungen enthalten sind. Zum Vergleich: Das gleiche Thema beansprucht im „Andrews/Moskovits“ 33 eng bedruckte Seiten. Etwas ausführlicher wird im nächsten Kapitel dann die Matrixphotochemie behandelt, wobei man den Autoren zugute halten muß, daß sie wenigstens kurz und aus dritter Hand auf die Anfang der achtziger Jahre ent-wickelten Techniken der Photolyse in flüssigen Edelgasen sowie der Blitzphotolyse mit Infrarot-Detektion eingehen.

Spezies mit Wasserstoffbrückenbindungen sowie Isomerisierungen in der Matrix sind das Thema des 5. Kapitels; ionische und Hochenergiemoleküle werden im 6. Kapitel dis-kutiert. Das nächste Kapitel, Atome und kleine Cluster, war zum Zeitpunkt der Drucklegung bereits in einem Buch und mehreren Übersichtsartikeln angesprochen worden. Dies war wohl Grund genug für die Autoren, sich auf Resonanz-Raman-Studien an Dimeren und Trimeren sowie auf die Eisen-Cokondensationsexperimente der Gruppe von *Margrave* in Houston zu beschränken. Leider fehlen Hinweise auf die im Berichtszeitraum erfolgten Studien an Bimetall-clustern völlig.

Nur wenige Arbeitsgruppen beschäftigen sich mit dem Thema des achten Kapitels, Astrochemie und atmosphäri-sche Prozesse. Um so erfreulicher ist es, hier einmal die inter-disziplinäre Anwendungsnähe der Matrixtechnik anschau-lich erläutert zu sehen.

Der Rest des Buches wird fast ausschließlich von vier Tabellen eingenommen, in der für jede Spezies die Methode der Herstellung, die spektroskopische Detektionsart, essen-tielle Ergebnisse und Literaturstellen aufgeführt werden. Die Reihenfolge erscheint allerdings etwas unsystematisch. So bleibt es dem Leser überlassen, ob er ein gewünschtes Mole-kül eher bei den anorganischen (Tabelle 7, 93 Seiten), metal-lorganischen (Tabelle 8, 41 Seiten) oder organischen Spezies (Tabelle 9, 95 Seiten) suchen will, oder vielleicht gar bei den molekularen Komplexen (Tabelle 10, 18 Seiten). Im Zweifels-fall lohnt sich der Versuch einer Permutation (AgCr er-

scheint bei CrAg) oder besser der Blick in die übersichtliche-re Matrix-Bibliographie von *Ball* et al. Die knapp 2250 Literaturstellen, in der Reihenfolge der behandelten Atome und Moleküle numeriert, wären sicherlich nach einem ande-ren Sortierkriterium, z. B. dem ersten Autor, nützlich und überprüfbar. Es bleibt unerfindlich, warum 63 Literaturstel-len separat in der Mitte des Buches aufgeführt werden.

Fazit: Ein in begrenztem Rahmen nützliches Buch, wenig geeignet für den Einsteiger in die Matrixspektroskopie. Als Teil der Reihe „Advances in Spectroscopy“ gehört es den-noch in die wissenschaftliche Bibliothek. Für den Praktiker liegt die Stärke in der kommentierenden Zusammenfassung der Forschungsergebnisse.

Werner E. Klotzbücher [NB 1109]
Max-Planck-Institut für Strahlenchemie,
Mülheim

One and Two Dimensional NMR Spectroscopy. Von *Atta-ur-Rahman*. Elsevier, Amsterdam 1989. XIX, 578 S., geb. Hfl. 355.00.—ISBN 0-444-87316-3

Der Verfasser des vorliegenden Buches versucht, einen umfassenden Überblick über die moderne NMR-Spektro-skopie zu vermitteln. Er beschreibt in leicht verständlicher Weise die Grundlagen der jüngsten Generation ein- und zweidimensionaler (1D- bzw. 2D-) NMR-Techniken. Zur Beschreibung der Vielzahl von Pulssequenzen, die in diesem Buch enthalten sind, wählt er ausschließlich den weitverbrei-teten Ansatz des Vektormodells. Dieser zu stark vereinfachende Ansatz hat den Nachteil, daß die Erklärung vieler auf Mehrquantenkohärenzen beruhenden Techniken leidet.

Im ersten Kapitel des Buches werden viele der allgemein benutzten Begriffe der modernen NMR-Technik eingeführt. Die behandelten Themen reichen von einer vereinfachten Beschreibung der Spektrometer-Konfiguration über Daten-akquisition und dynamischen Bereich, Fourier-Transforma-tion, Phasencyklen, Lösungsmittelsignalunterdrückung und Nuclear-Overhauser-Enhancement-(NOE)-Effekt bis hin zu Begriffen der Theorie der NMR-Spektroskopie wie Kohä-renztransfer und Mehrquantenfilter. Zudem beschreibt das Kapitel knapp den Produktoperatorformalismus, der in der Entwicklung der modernen gepulsten NMR-Technik eine entscheidende Rolle spielt. In den folgenden Kapiteln wird auf diesen Formalismus jedoch nicht mehr zurückgegriffen. Erst das letzte Kapitel (Kapitel 14) beschreibt den Produkt-operatorformalismus nochmals eingehender.

Die Kapitel 2, 3 und 4 beschäftigen sich mit modernen 1D-NMR-Techniken. Kapitel 2 erklärt zunächst das „Spin-Echo“-Phänomen in homo- und heteronuclearen Spinsyste-men sowie Aufnahmetechniken („spectral editing“), die eine große Anzahl unterschiedlicher Pulssequenzen, unter an-derem alle „Sørensen-Variationen“, zur Grundlage haben. Ka-pitel 3 ist der früher sehr beliebten 1D-INADEQUATE-Technik gewidmet, von der ebenfalls viele Varianten angeführt werden. In Kapitel 4 findet der Leser eine fast ausschließlich qualitative, aber dennoch hilfreiche Beschrei-bung der häufigsten Relaxationsmechanismen, insbesondere des NOE-Effekts und seiner Anwendung zur Strukturauf-klärung in der Chemie.

Nach einer kurzen Einführung in die Fourier-Transforma-tion im 5. Kapitel wird bis zum Ende des Buches das breite Spektrum an Pulssequenzen dargestellt, die im vergangenen Jahrzehnt entwickelt wurden. Die ersten Kapitel zur 2D-NMR-Spektroskopie behandeln heteronucleare und homo-nucleare J-aufgelöste Spektroskopie.

Kapitel 8 präsentiert Techniken wie das COSY-Experi-ment und die daraus abgeleiteten Experimente, die auf Kor-