

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