

Einige wichtige Techniken, um Cluster im Clusterstrahl zu beobachten und Meßergebnisse zu interpretieren, werden von *A. W. Castleman, Jr.* und *R. G. Keese* vorgestellt. Besondere Aufmerksamkeit kommt dabei der resonanten Multiphotonen-Ionisation von Clustern mit nachfolgender Detektion in einem Flugzeit-Massenspektrometer zu.

Das siebte Kapitel stellt einen weiteren wesentlichen Beitrag dieses Buches dar. *E. R. Bernstein*, der Herausgeber, beschreibt auf 200 Seiten die Eigenschaften einer speziellen Klasse von Molekül-Clustern. Diese Cluster bestehen aus mindestens zwei verschiedenen, meist organischen Molekülen, von denen das eine spektroskopisch aktiv ist. Durch Absorptions- und Anregungsspektroskopie sowie Computersimulationen können Grundzustand und angeregte Zustände dieser Molekül-Cluster untersucht werden.

Das achte und letzte Kapitel gibt einen von *R. L. Whetten* und *M. Y. Hahn* gut geschriebenen Überblick über die Spektroskopie an großen Molekül-Clustern. Es enthält eine Diskussion des Tröpfchenmodells, der elementaren Anregungsformen und des Flüssig-fest-Phasenüberganges in Molekül-Clustern.

Von der Konzeption füllt dieses Buch die Lücke, die zwischen internationalen Konferenzberichten und allgemein gehaltenen Übersichten besteht. Mit seiner großen Fülle an Information ist es eine willkommene Bereicherung in der Bibliothek eines jeden Cluster-Physikers.

Thomas Lange, T. Patrick Martin [NB 1114]
Max-Planck-Institut
für Festkörperforschung, Stuttgart

Chemical Bonding Theory. Von *B. Webster*. Blackwell Scientific Publications, Oxford 1990. X, 276 S., Paperback £ 14.95. – ISBN 0-632-01621-3

Das vorliegende Buch ist eine bewußt knapp gehaltene Einführung in die Theorie der chemischen Bindung. Die Zielgruppe sind Studenten vor dem Vordiplom und Dozenten, die im Vordiplomstudium lehren. Für letztere werden Breite und Tiefe der Monographie unzureichend sein, jedoch sind Gliederung und Stoffauswahl als attraktive Grundlage zur Vorlesungsvorbereitung empfehlenswert. In vier Kapiteln (1. Elektronenpaare und Molekülgestalt, 2. Das Orbitalmodell der atomaren Struktur, 3. Zweiatomige Moleküle, 4. Mehratomige Moleküle) werden grundlegende ältere, aber auch sehr aktuelle Ansätze zur Beschreibung der chemischen Bindung präsentiert.

Im ersten Kapitel wird nach der Lewisschen Elektronenpaarbeschreibung der VSEPR-Ansatz von *Nyholm* und *Gillespie* dargelegt. Am Ende vermißt man nach einem Beispiel für die sogenannte Hypervalenz (SF_6) allerdings den wichtigen Hinweis, daß die MO-Theorie die zugehörige chemische Bindung auch ohne diesen Begriff zu erklären vermag.

Im zweiten Kapitel folgt dem atomaren Aufbauprinzip ein kurzer spektroskopischer Teil, der mit der Beschreibung von Spin-Bahn-Wechselwirkungen in der Russel-Saunders-Kopplung endet. Ionisierungsenergie, Elektronenaffinität, effektive Kernladung, Radien und Polarisierbarkeiten werden dargestellt. Wie üblich erscheinen festkörperchemische Aspekte äußerst fragmentarisch und im falschen Kapitel. Erfreulich ist aber, daß im Gegensatz zu wesentlich umfangreicherem Werken, wie z. B. dem von *Huheey*, wenigstens der Madelung-Faktor einmal allgemein (und nicht wie sonst irreführend nur für AB-Verbindungen) hergeleitet wird. Mit den Übungsaufgaben wird der Begriff dann auch für Studenten zum echten Hilfsmittel. Nach Einführung von Radien-

verhältnissen und deren Bedeutung werden mit Nachbarschaftsdiagrammen nach *W. B. Pearson* und Strukturberreichsfeldern auch sehr aktuelle Beziehungen zwischen Struktur, chemischer Bindung und Zusammensetzung angesprochen.

Zweiatomige Moleküle dienen als Modellsysteme zur Entwicklung von Molekülorbitalen, wobei sich Betrachtungen zur Polarität der chemischen Bindung und wiederum zu Radien anschließen. Hier könnte ausführlicher argumentiert und noch einiges ergänzt werden, zum Beispiel die Konzepte von *Drago* et al. und *Fajans* zum Säure-Base-Verhalten. Die Dynamik zweiatomiger Moleküle findet dagegen im Rahmen dieser Monographie ausreichend Platz, unter anderem mit der Analyse von Rotations-Schwingungs-Spektren und den zugehörigen Auswahlregeln. Berlin-Regionen – abermals sehr aktuell – beschließen den Abschnitt mit modernen Betrachtungen zur Elektronendichte.

Am Beispiel polyatomarer Moleküle werden komplexere MO-Schemata und ihre Symmetrieeigenschaften sowie die Ligandenfeldtheorie besprochen. Auch allfällige Verzerrungen, Jahn-Teller-Effekt und Walsh-Diagramme werden in diesem Zusammenhang beleuchtet. Den letzten Teil bildet ein Abschnitt über Elektronenzählregeln in polyedrischen Molekülen am Beispiel der Borane.

In ebenfalls knapper, aber ausgewählter Form beschließen Datensammlung, Aufgabenlösungen, Literatur- und Inhaltsverzeichnis das Buch. Erfreulich und sehr hilfreich sind die Angaben zu den Zielsetzungen in jedem Kapitel sowie die Übungsaufgaben. Die Monographie ist als Repetitorium gut geeignet und liegt in einer erschwinglichen Paperback-Ausgabe vor.

Zweifellos hat der Autor das Buch aus eigener Lehrerfahrung heraus gestaltet, dabei stets versucht, alte Grundlagen mit sehr aktuellen Ergebnissen zu kombinieren – und dies auf nur 270 Seiten. An manchen Stellen sind denn auch die Sprünge in der Argumentation groß, und der Lernende wird auf die vertiefende Literatur zurückgreifen müssen. Trotzdem, in der Kürze liegt die Würze – das Buch ist empfehlenswert.

Reinhard Nesper [NB 1130]
Laboratorium für Anorganische Chemie
der Eidgenössischen Technischen Hochschule
Zürich (Schweiz)

Organic Chemistry in Action. The Design of Organic Synthesis. (Reihe: Studies in Organic Chemistry 41). Von *F. Serratosa*. Elsevier, Amsterdam 1990. XXI, 395 S., geb. HFI. 290.00. – ISBN 0-444-88345-2

Die Synthese ist immer noch das zentrale Betätigungsgebiet für viele Organiker. Die Systematisierung der Retrosynthese, wie sie von *Corey* propagiert worden ist, hat zur Renaissance der Synthesechemie beigetragen. Die große Zahl der in den letzten Jahren publizierten Naturstoffsynthesen ist ein Ausdruck der Stärke der heutigen Synthesemethoden. Trotz dieser Blüte der Synthesechemie und der Syntheseplanung sind erstaunlich wenige Bücher auf dem Markt, in denen Synthese und Syntheseplanung gelehrt werden. Das Buch „Organic Chemistry in Action“ von *F. Serratosa* zusammen mit der Programmdiskette CHAOS will eine orientierende Einführung in die Organische Synthese sein. Die Kombination Buch und Computerprogramm ist neu und soll dem Anfänger den Einstieg erleichtern.

Serratosas Buch läßt sich in vier Teile einteilen. In den Kapiteln 1 bis 4 werden die Grundkonzepte der Syntheseplanung besprochen. Nach einer kurzen Einführung in die Ge-

schichte der Synthese und in die Kriterien zur Beurteilung von Organischen Synthesen folgt ein Kapitel über die Einteilung der Reaktivität organischer Moleküle nach *Evans*. Danach werden die Konzepte der Retrosynthese eingeführt. Im zweiten Teil werden spezifische Syntheseprobleme behandelt. Es geht dabei um die Synthese von „dissonanten“ Systemen oder – in der bekannteren Nomenklatur nach *Seebach* – um die Anwendung des Umpolungskonzepts. Danach werden die wichtigsten Herstellungsmethoden von Ringen behandelt. Strategien, welche zu quartären Kohlenstoffatomen und verbrückten Ringsystemen führen, sind der Inhalt des 7. Kapitels. In didaktisch geschickter Weise werden *Coreys* Regeln zur Auffindung von strategischen Bindungen am Beispiel des Patchouli-Alkohols vorgeführt. Abgeschlossen wird dieser Teil mit einer Diskussion der stereochemischen Kontrolle von Reaktionen an Ringen und in acyclischen Systemen. Im Kapitel 9 über die Diastereoselektivität bei Reaktionen acyclischer Verbindungen werden mehrere Varianten der Aldolreaktion und die Sharpless-Epoxidierung besprochen. Im dritten Teil, der den Abschluß des reinen Textteils bildet, werden die Regeln und heuristischen Prinzipien noch einmal zusammengefaßt und ihre Anwendung an einer Reihe von Beispielen aus der Literatur demonstriert. Der letzte Teil der Publikation ist unglücklicherweise etwas verstreut angeordnet. Er setzt sich zusammen aus dem Kapitel 11, den Anhängen 2–4 und der Diskette mit einer Kopie des Programms CHAOS (Computerisation and Heuristics Applied to Organic Synthesis). Im Anhang 2 findet der Leser die Anleitung für die Benutzung des Programms. Darauf sind die Retrosyntheseschritte aufgelistet, die vom Computerprogramm angewendet werden, und schließlich werden Vorschläge für Übungen gemacht. Das Kapitel 11, das eine Beschreibung des Programms enthält, ist im Text des Buches ein Fremdkörper.

Der Versuch, ein Lehrbuch über Synthese und Syntheseplanung mit einem Syntheseprogramm zu vereinen, ist lobenswert. Leider kann das vorliegende Werk nicht als der optimale Weg für den Unterricht angepriesen werden. Das Syntheseprogramm ist zu wenig ausgefeilt. Es eignet sich in dieser Form weder als didaktisches Hilfsmittel noch als Ersatz für andere Syntheseprogramme oder Reaktionsdatenbanken. Beim hohen Preis für dieses Werk wird der Ankauf nur für Bibliotheken und für Dozenten, die eine Vorlesung über Synthese halten, in Frage kommen. Die vielen interessanten Synthesebeispiele im Text machen eine baldige Publikation einer wesentlich billigeren Fassung ohne Diskette wünschenswert, damit das Werk auch für Studenten zugänglich wird. Man könnte dann auch die allzu vielen Druckfehler korrigieren.

Reinhard Neier [NB 1127]
Institut für Organische Chemie
der Universität Fribourg (Schweiz)

Basis Principles and Techniques of Molecular Quantum Mechanics. Von *R. E. Christoffersen*. Springer, Berlin 1990, XIV, 686 S., geb. DM 178.00. – ISBN 3-540-96759-1

Dieses Buch ist ein umfangreiches Lehr- und Nachschlagewerk über die theoretischen Grundlagen der Quantenchemie sowie deren praktische Anwendungen. Von ähnlichen Büchern unterscheidet es sich unter anderem durch den Umfang der Beschreibung des mathematischen Unterbaus der quantenchemischen Methoden.

Nach einem kurzen einführenden Abschnitt, in dem einige Konzepte der klassischen Mechanik rekapituliert und die experimentellen Beobachtungen, die zur Formulierung der

Quantenmechanik geführt haben, vorgestellt werden, folgen 140 Seiten über Vektor- und Funktionsräume, Matrizen- und Operatoralgebra etc. Es schließen sich Kapitel an, in denen die Postulate der Quantenmechanik eingeführt und die üblichen Modellprobleme (Teilchen im Kasten, harmonischer Oszillator, Wasserstoffatom etc.) vorgestellt werden. Verhältnismäßig ausführlich wird der Hamilton-Operator für molekulare Systeme diskutiert, wobei externe elektromagnetische Felder ebenso wie relativistische Effekte Eingang in die Diskussion finden. Der letzte Abschnitt des Buches enthält eine ebenfalls detaillierte Behandlung der gängigen quantenchemischen Näherungsmethoden wie closed- und open-shell-Hartree-Fock-SCF, Störungstheorie und Konfigurationswechselwirkung.

Im großen und ganzen macht das Buch einen soliden, von kompetenter Hand geschriebenen Eindruck. Vieles wird erläutert, was man sonst nur selten in vergleichbaren Lehrbüchern findet, z. B. die ausführliche Diskussion von Rayleigh-Schrödinger- und Brillouin-Wigner-Störungstheorie, die mögliche Berechnung unterer Schranken für die Energie, aber auch Details wie den Ursprung der s,p,d, ...-Nomenklatur von Atomorbitalen. Allerdings muß bezweifelt werden, ob das ehrgeizige Vorhaben, den komplexen mathematischen Hintergrund in einer detaillierten und zugleich dem Studenten verständlichen Form vorzustellen, durchweg gelungen ist. Zu oft werden Beweise und Theoreme nur andiskutiert und der Leser in einer der sehr vielen Fußnoten auf die Originalliteratur verwiesen. Zudem wird die Mathematik ohne direkten Bezug zu ihrer Anwendung beschrieben, so daß befürchtet werden muß, daß viele Studenten diesen Teil des Buches als wenig attraktive Durststrecke empfinden werden.

Bedauerlich ist auch, daß die Diskussion der quantenchemischen Rechentechniken nicht immer dem aktuellen Stand gerecht wird. Neuere Entwicklungen wie die Verwendung direkter SCF-Verfahren zur Berechnung größerer Moleküle oder der Einsatz von Atomic-Natural-Orbital-Basisätzen werden nicht beschrieben. Bei der Diskussion des Multikonfigurations-SCF-Ansatzes sucht man vergebens nach einer Erwähnung der heute überwiegend verwendeten CASSCF-Methode, und auch die Diskussion der mittlerweile so wichtigen direkten CI-Verfahren kommt etwas zu kurz. Ein anderes Beispiel für die manchmal etwas veraltete Diskussion ist die Bemerkung *Christoffersens*, die Diagonalisierung einer 1000×1000 Matrix benötige mehrere Sekunden, tatsächlich erledigen moderne Höchstleistungsrechner solche Aufgaben in Bruchteilen von Sekunden. Dieser Mangel an Aktualität spiegelt sich auch in der Auswahl der zitierten Literatur wider, die zumeist aus den siebziger und frühen achtziger Jahren stammt.

Leider haben sich auch viele Druckfehler in den Text eingeschlichen, die zum Teil etwas verwirren. So wird aus „yield“, „field“, in einer Formel wird ein Faktor 1/2 unterschlagen, und statt mit „external force“ hat man es plötzlich mit „external face“ zu tun. Mit schöner Regelmäßigkeit wird aus einer „trial“- eine „trial“-Wellenfunktion, und selbst die Autorennamen in den Literaturverweisen sind vor Verunstaltungen nicht sicher. Besonders ärgerlich ist der Verweis auf eine Abbildung am Ende des 7. Kapitels, die man dort vergeblich sucht. Erst vier Kapitel später begegnet einem plötzlich der gleiche Abschnitt wieder, diesmal inclusive der Abbildung. Mit etwas Sorgfalt hätten solche groben Schnitzer sicherlich vermieden werden können.

Sieht man jedoch von diesen formalen Unzulänglichkeiten, der manchmal mangelnden Aktualität und der vielleicht nicht ganz geglückten Konzeption des mathematischen Teils einmal ab, ist *Christoffersens* Buch eine interessante Bereicherung des Lehrbuchangebots in der Theoretischen Che-