

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 „trail“-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 glücklichen Konzeption des mathematischen Teils einmal ab, ist *Christoffersens* Buch eine interessante Bereicherung des Lehrbuchangebots in der Theoretischen Che-

mie, das vor allem durch sein breitgefächertes Themenspektrum gefällt.

Wolfram Koch [NB 1116]

IBM Deutschland GmbH

Wissenschaftliches Zentrum Heidelberg

Institut für Supercomputing und angewandte Mathematik

Countercurrent Chromatography. Von *W. D. Conway*. VCH Verlagsgesellschaft mbH, Weinheim 1990. 475 S., geb. DM 138.00. – ISBN 3-527-26527-9

Die Verteilung von Substanzgemischen zwischen zwei flüssigen, nicht völlig miteinander mischbaren Phasen ist als Flüssig-Flüssig-Verteilung ein wirksames Verfahren zur Trennung von Gemischen schwerflüchtiger löslicher Substanzen. Es hat z.B. als Craig-Verteilung oder Verteilung-chromatographie Geschichte gemacht und ist auch heute noch Grundlage vieler technischer Trennprozesse. Leider ist dieses Verfahren im Labor weitgehend von den modernen chromatographischen Verfahren verdrängt worden. Dabei hätte es aufgrund seiner günstigen Eigenschaften auch heute noch sein Einsatzgebiet, insbesondere für die Isolierung und Reinigung präparativer Mengen von schwerflüchtigen Substanzen. Als besonderer Vorteil ist die einfache und präzise Berechenbarkeit der Trennungen und die leichte Übertragbarkeit in größere Dimensionen zu bewerten.

Es ist daher zu begrüßen, daß jetzt eine zusammenfassende Darstellung der neueren Entwicklung auf dem Gebiet der Flüssig-Flüssig-Chromatographie vorliegt. Die Hauptkapi-

tel des Buches beschreiben Entwicklung der Gegenstrom-Chromatographie, Erzeugung des Phasenflusses und der Zentrifugalkräfte, Flüssig-Verteilung und Mischung der Phasen, Theorie der Chromatographie, Lösungsmittelsysteme und Anwendungen. Eine umfangreiche und gut gegliederte Literatursammlung ist dem Text angefügt.

Es werden die Techniken und Geräte für die chromatographische Trennung behandelt, die ohne Benutzung eines festen, porösen Trägers zwischen zwei flüssigen Phasen, meistens in einer Spirale aus Glas oder Kunststoff, stattfindet. Die Phasen werden durch Schwerkraft oder Zentrifugalkräfte gegeneinander bewegt. Die Zentrifugalkräfte werden durch verschiedenartige Rotation der Trenneinrichtungen erzeugt. Die Vielzahl der beschriebenen Varianten läßt erkennen, daß die Entwicklung noch keineswegs abgeschlossen ist und eine allgemeine einsetzbare Routineapparatur wohl noch etwas auf sich warten lassen wird. Mit den beschriebenen Apparaturen lassen sich bis zu 1 g Gemisch bei einer Trennleistung von 350–1000 Böden trennen. Die Trenndauer liegt im Stundenbereich.

Ogleich die Gegenstrom-Chromatographie sicher immer eine Spezialmethode bleiben wird, so ist ihr doch eine weite Verbreitung zu wünschen. Bei der stets zunehmenden Bedeutung der Isolierung und Reinigung von Substanzen sollte möglichst das gesamte Spektrum der leistungsfähigen Trennverfahren verfügbar sein. Das vorliegende Buch ist eine umfassende Einführung in dieses Gebiet und kann zur Nutzung nur empfohlen werden.

Herbert Feltkamp [NB 1133]

Bayer AG

Pharma Analytik und Qualitätskontrolle, Leverkusen

Angewandte Chemie. Fortsetzung der Zeitschrift „Die Chemie“

Die Wiedergabe von Gebrauchsnamen, Handelsnamen, Warenbezeichnungen und dgl. in dieser Zeitschrift berechtigt nicht zu der Annahme, daß solche Namen ohne weiteres von jedermann benutzt werden dürfen. Vielmehr handelt es sich häufig um gesetzlich geschützte eingetragene Warenzeichen, auch wenn sie nicht eigens als solche gekennzeichnet sind.

© VCH Verlagsgesellschaft mbH, W-6940 Weinheim, 1991

Printed in the Federal Republic of Germany

Telefon (0 6201) 602-0, Telex 465516 vchwh d, Telefax (06201) 60 23 28, E-Mail Z16@DHDURZ2 in Earn Bitnet

Geschäftsführer: *Hans-Dirk Köhler, Dr. Hardy G. Sehr*

Verantwortlich für den wissenschaftlichen Inhalt: *Dr. Peter Göltz*

Anzeigenleitung: *Rainer J. Roth*



Die Auflage und die Verbreitung wird von der IVW kontrolliert.

Alle Rechte, insbesondere die der Übersetzung in fremde Sprachen, vorbehalten. Kein Teil dieser Zeitschrift darf ohne schriftliche Genehmigung des Verlages in irgendeiner Form - durch Photokopie, Mikrofilm oder irgendein anderes Verfahren - reproduziert oder in eine von Maschinen, insbesondere von Datenverarbeitungsmaschinen verwendbare Sprache übertragen oder übersetzt werden. All rights reserved (including those of translation into foreign languages). No part of this issue may be reproduced in any form - by photostat, microfilm, or any other means - nor transmitted or translated into a machine language without the permission in writing of the publishers. - Von einzelnen Beiträgen oder Teilen von ihnen dürfen nur einzelne Vervielfältigungsstücke für den persönlichen und sonstigen eigenen Gebrauch hergestellt werden. Die Weitergabe von Vervielfältigungen, gleichgültig zu welchem Zweck sie hergestellt werden, ist eine Urheberrechtsverletzung.

Der Inhalt dieses Heftes wurde sorgfältig erarbeitet. Dennoch übernehmen Autoren, Herausgeber und Verlag für die Richtigkeit von Angaben, Hinweisen und Ratschlägen sowie für eventuelle Druckfehler keine Haftung. · This journal was carefully produced in all its parts. Nevertheless, authors, editor and publisher do not warrant the information contained therein to be free of errors. Readers are advised to keep in mind that statements, data, illustrations, procedural details or other items may inadvertently be inaccurate.

Valid for users in the USA: The appearance of the code at the bottom of the first page of an article in this journal (serial) indicates the copyright owner's consent that copies of the article may be made for personal or internal use, or for the personal or internal use of specific clients. This consent is given on the condition, however, that the copier pay the stated percopy fee through the Copyright Clearance Center, Inc., for copying beyond that permitted by Sections 107 or 108 of the U.S. Copyright Law. This consent does not extend to other kinds of copying, such as a copying for general distribution, for advertising or promotional purposes, for creating new collective works, or for resale. For copying from back volumes of this journal see 'Permissions to Photo-Copy: Publisher's Fee List' of the CCC.