

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 101161, 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.

Computational Chemistry Using the PC. Von D. W. Rogers. VCH Verlagsgesellschaft, Weinheim 1990. VIII, 224 S., geb. DM 98.00. - ISBN 3-527-27937-7

„Computational Chemistry“ ist ein nicht sehr exakt definierter Begriff. Gemeint sind damit im vorliegenden Buch im wesentlichen Molekülmechanik und Molekülorbital-Berechnungen und deren zugrundeliegende numerische Methoden. Im Gegensatz zu den zahlreichen Monographien, die die Theorie der Molekül- und Quantenmechanik behandeln, wird hier versucht, eine Einführung in die Programmierung solcher Methoden und den Umgang mit ihnen zu geben. Um es vorwegzunehmen: Ich halte den Ansatz für sinnvoll und die Ausführung für gelungen. Die meisten „Computerchemiker“ haben den Zugang zu diesem Gebiet im Quereinstieg durch Weiterentwicklung bereits bestehender Programmsysteme gefunden und mußten sich die notwendige numerische Mathematik aus verschiedenen Quellen erarbeiten. Das vorliegende Buch bietet nun eine systematische Einführung von den grundlegenden numerischen Methoden bis zur Arbeit mit fertigen HMO- und SCF-Programmen. Jedes Kapitel ist mit zahlreichen Übungen ausgestattet, zu denen meist auch die Lösung mitgeliefert wird. Eine didaktische Neuheit – zumindest im Rahmen eines Lehrbuchs – sind die „Computerprojekte“. Dies sind Anleitungen zur Lösung physikalisch-chemischer Probleme unter Verwendung von Computerprogrammen. Die zumeist in Basic geschriebenen Programme sind dem Buch auf einer 5 1/4-Zoll-Diskette beigelegt und unter DOS auf jedem IBM-kompatiblen PC lesbar und lauffähig.

Das Buch gliedert sich in zwei Teile. In den ersten Kapiteln werden die Grundlagen zur Programmierung numerischer Methoden gelegt. Iterative Methoden und numerische Integration sind durch Beispiele aus der Physikalischen Chemie (z. B. van-der-Waals-Gleichung, Wiensches Gesetz und Maxwell-Boltzmann-Verteilung) erläutert. Matrix-Operationen und Kurvenanpassung schließen sich an. Die letzten sieben Kapitel beschäftigen sich mit Molekülorbital-Rechnungen, Molekülmechanik und Molekülgraphik. Spätestens bei der Behandlung der MO-Theorie stößt der Autor auf die bereits aus der Problemstellung herrührende Schwierigkeit, entweder in die Quantentheorie einführen zu müssen (und damit den Rahmen des Buches zu sprengen) oder sie vorauszusetzen. Er entscheidet sich für einen Mittelweg. Die theoretischen Einführungen sind kurz und sehr gestrafft. Beim Selbststudium des Buches sollten daher die wichtigsten

Grundlagen bekannt sein, oder es sollte ein Lehrbuch der theoretischen oder physikalischen Chemie bereit liegen. Unter diesen Voraussetzungen liefern die Kapitel über Molekülmechanik und MO-Verfahren (Hückel, EHT, PPP, MNDO, ab initio usw.) einen tieferen Einblick in die Arbeitsweise dieser Programme.

Das Buch schließt eine wichtige Marktlücke zwischen den (wenigen) Büchern zur Anwendung der am weitesten verbreiteten Molekülmechanik- und MO-Programme auf chemische Probleme (z. B. T. Clarks Buch „A Handbook of Computational Chemistry“) und den reinen Lehrbüchern der Theoretischen Chemie. Es wird gezeigt, daß bei dem heutigen Entwicklungsstand der PCs bereits anspruchsvolle Software auf billiger, für fast jeden Studenten erschwinglicher Hardware nutzbringend anwendbar ist. Im Gegensatz dazu steht der hohe Preis des Buches. Dafür darf sich das Auge an der vom VCH-Verlag gewohnten, perfekten Satztechnik erfreuen. Das vorliegende Buch eignet sich hervorragend zum Selbststudium für Dozenten und Studenten ab Vordiplom. Vor allem Anwendern der Black-Box-Programmsysteme wie GAUSS oder MOPAC, die gern ein wenig besser verstehen möchten (sollten), was sie rechnen, kann man das Buch wärmstens empfehlen.

Rainer Herges [NB 1132]
Institut für Organische Chemie der
Universität Erlangen-Nürnberg

Metals and Ligand Reactivity. Von E. C. Constable. Ellis Horwood, New York 1990. XII, 246 S., geb. \$ 54.50. - ISBN 0-13-577222-2

Die stürmische Entwicklung der neuen metallorganischen Chemie mit ihren teilweise exotischen Strukturen und Bindungsverhältnissen hat seit etwa 1960 die klassischen Koordinationsverbindungen vorübergehend in den Hintergrund gedrängt. Standen letztere noch in den fünfziger Jahren aufgrund der erfolgreichen Verknüpfung von Spektroskopie, Reaktivität und Ligandenfeldtheorie im Mittelpunkt molekularer anorganischer Chemie, so dringt erst allmählich wieder ihre Bedeutung, hauptsächlich über das neu entstandene Forschungsgebiet *Bioanorganische Chemie*, ins allgemeine Bewußtsein zurück. Unabhängig von den erstaunlichen Leistungen der Metallzentren in Enzymen sind jedoch durch nicht-metallorganische Koordination ermöglichte oder katalysierte organisch-chemische Transformationen unentbehrlich für die synthetische und technische Praxis. Wer hieran unmittelbar interessiert ist oder die klassische Koordinationschemie als langweilig, theorieüberladen und irrelevant empfunden hat, der findet in *Constables* Darstellung ein überaus lesbares Buch zum bequemen Nachholen. Im Mittelpunkt dieser Monographie steht die Beeinflussung der Reaktivität Heteroatomdonor-kordinierter organischer Verbindungen durch (Übergangs-)Metallzentren.

Die Lesbarkeit dieses Buches wird vor allem durch Konzentration auf synthetische Nützlichkeit, durch weitgehenden Verzicht auf physikalisch-chemische Reaktionsdaten sowie durch Abwesenheit von Zitaten im Text gefördert. Weiterführende Literatur ist am Ende des Buches nach Themenbereichen zusammengestellt – notfalls gibt vermutlich der Autor detailliertere Auskunft.

Zu Beginn führt *Constable* mit aller Kürze in die notwendigen Orbitalmodelle ein; bei der qualitativen Darstellung chemischer Reaktivität bleibt leider der Aspekt der Katalyse