

- [4] J. S. Miller, *Adv. Mater.* **1991**, *3*, 262–265; F. Diederich, R. L. Whetten, *Angew. Chem.* **1991**, *103*, 695–697; *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **1991**, *30*, 678–680.
- [5] T. G. Dietz, M. A. Duncan, D. E. Powers, R. E. Smalley, *J. Chem. Phys.* **1981**, *74*, 6511–6512; R. E. Haufner, Y. Chai, L. P. F. Chibante, J. Conceicao, C. Jin, L. S. Wang, S. Maruyama, R. E. Smalley, *Mater. Res. Soc. Symp. Proc.* **1991**, *206*, 627–637.
- [6] J. B. Howard, J. McKinnon, Y. Makarovskiy, L. Lafleur, M. Elaine Johnson, *Nature* **1991**, *352*, 139–141.
- [7] W. Krätschmer, K. Fostiropoulos, D. R. Huffman, *Chem. Phys. Lett.* **1990**, *170*, 167–170; W. Krätschmer, L. D. Lamb, K. Fostiropoulos, D. R. Huffman, *Nature* **1990**, *347*, 354–358; A. S. Koch, K. C. Khemani, F. Wudl, *J. Org. Chem.* **1991**, *56*, 4543–4545.
- [8] Die notwendigen Inertbedingungen lassen sich am besten mit einem wassergerührten Reaktionsrohr aus Quarzglas, das über einen Metallschliff mit Gaszuleitungs- und Pumpensystem verbunden ist, gewährleisten. Hierbei gilt es, den richtigen Kompromiß zwischen Leistungszufluß durch den Induktor des HF-Generators und Leistungsabfluß über das Kühlwasser zu finden. Eine wesentliche Verbesserung der Leistungsaufnahme bewirkt die Verwendung eines einfachen oder doppelten Isolierrohrs aus pyrolytischem Bornitrid (PBN), das die Temperatur am Ort des Graphits erhöht und an der Quarzglasfläche senkt. Eine zusätzliche Wirkung der PBN-Rohre kann in der Schaffung einer vergrößerten heißen Reaktionszone (eventuelle Gasphasenabscheidung von Fullererenen an Rußpartikeln) oder auch durch einen Kamineffekt bestehen.
- [9] Die Temperaturmessung erfolgt bis zum Beginn der Rußentwicklung pyrometrisch an der Graphitoberfläche, sodann wird die Temperatur mit den Leistungsdaten des Generators durch Extrapolation bestimmt.
- [10] Die Massenspektren wurden mit einem Spektrometer Concept 1 H (Firma Kratos, Manchester) aufgenommen (Ionisierungsmethode: EI).

Beweis der Existenz einer endohedralem He@C₆₀-Struktur durch Gasphasenneutralisation von HeC₆₀⁺**

Von Thomas Weiske, Thomas Wong, Wolfgang Krätschmer, Johan K. Terlouw und Helmut Schwarz*

Professor Fred W. McLafferty gewidmet

Einer der interessantesten Aspekte von C₆₀-Fullerenen^[1] ist der 7 Å große Hohlraum^[2], der als molekularer Container^[3] für Atome dienen kann und somit die Möglichkeit einer endohedralem Chemie^[4] – d.h. einer Chemie im Innern des Käfigs – bietet. Tatsächlich gelang es Smalley et al.^[5], durch Laserverdampfung von dotiertem Graphit metallhaltige Fullerene des Typs MC₆₀ (M = La, Ni, Na, K, Rb, Cs) und LaC_x (x = 60, 70, 74, 82) herzustellen. War die Frage nach dem Aufenthaltsort des Metalls (*endo*- versus *exo*-Komplex) auch ursprünglich strittig^[6], muß durch den Vergleich kürzlich bei thermischer Energie in einer Ion/Molekülreaktion^[7] erzeugten exohedralem Fullerene-Komplexen des Typs MC₆₀⁺ (M = Fe, Co, Ni, Cu, Rh, La, VO) geschlossen werden, daß in Smalleys Experimenten^[5] im Zuge des Cluster-Aufbaus die Metalle eingeschlossen wurden und tatsächlich endohedrale Fullerene-Metallkomplexe entstanden sind, für die das Symbol M@C_x vorgeschlagen wurde^[5c]. Für Komplexe des Typs M@C₆₀⁺ (und auch höhere Fullerene) gilt, daß sie

[*] Prof. Dr. H. Schwarz, Dr. T. Weiske

Institut für Organische Chemie der Technischen Universität
Straße des 17. Juni 135, W-1000 Berlin 12

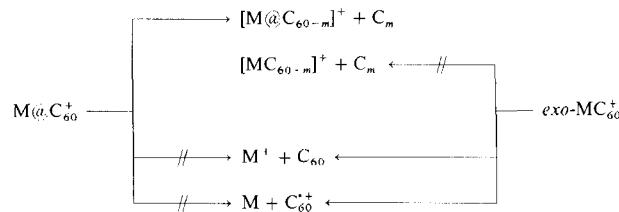
Prof. Dr. J. K. Terlouw, T. Wong
Department of Chemistry
McMaster University

Hamilton, Ontario, L8S 4M1 (Kanada)

Dr. W. Krätschmer
Max-Planck-Institut für Kernphysik
Postfach 103980, W-6900 Heidelberg

[**] Diese Arbeit wurde von der Deutschen Forschungsgemeinschaft, dem Fonds der Chemischen Industrie und dem Natural Sciences and Engineering Research Council of Canada (NSERC) gefördert. Prof. D. K. Bohme und Dr. J. Hrušák danken wir für wichtige Diskussionsbeiträge.

unter massenspektrometrischen Bedingungen nach Stoß- oder Laser-Anregung C₂ oder multiple Einheiten von C₂ verlieren, wobei das Metall im Käfig eingeschlossen bleibt (Schema 1). Bei exohedralem Komplexen hingegen wird nach Anregung das Metall eliminiert; C_m-Verlust wird nicht beobachtet.



Schema 1. Typische Reaktionen von Fullerene-Metallkomplexen. m = 2, 4, 6 etc.

In einem grundsätzlich anderen Experiment haben wir^[8] und später auch andere Gruppen^[9] gezeigt, daß auch die Edelgasatome He und Ne in C₆₀⁺- und C₇₀⁺-Fullerenen eingebaut werden^[10], wenn hochbeschleunigte C_x⁺-Ionen in einem Molekularstrahlexperiment durch eine stationäre Edelgasatmosphäre geschossen werden. Obwohl die resultierenden MC_x⁺-Komplexe (M = He, Ne) bei Anregung exakt nach dem für endohedrale Verbindungen typischen Muster unter Retention von M und Abspaltung von C_m fragmentieren (Schema 1) und auch alle theoretischen Argumente eine Struktur favorisieren, bei der die Edelgasatome im Innern des Käfigs physikalisch eingeschlossen sind und durch Energiebarrieren größer 8 eV^[8, 9] am Verlassen ihres Gefängnisses gehindert werden, sind einzelne kritische Stimmen nicht verstummt, die die endohedrale Struktur erst dann für bewiesen halten, wenn es gelingt, neutrale Edelgas-Fulleren-Komplexe herzustellen. Wird der Nachweis erbracht, daß neutrale Fullerene-Edelgas-Komplexe eine endliche Lebensdauer haben, so folgt zwingend, daß sich das Edelgas physikalisch im Hohlraum des Clusters befinden muß.

Wir berichten hier über ein Gasphasenexperiment, bei dem mit Hilfe der Neutralisations-Reionisations-Massenspektrometrie (NRMS)^[11] C₆₀He⁺-Ionen erfolgreich neutralisiert und anschließend reionisiert worden sind. Die experimentell bedingte minimale Lebensdauer des neutralen C₆₀He beträgt etwa 90 μs, und das Resultat belegt definitiv, daß sowohl der Neutralkomplex als auch sein kationischer Vorläufer eine endohedrale Struktur, He@C₆₀ bzw. He@C₆₀⁺, haben^[12].

Alle Versuche wurden mit dem in Abbildung 1 skizzierten Viersektoren-Massenspektrometer durchgeführt^[13], wobei den in Abbildung 2 wiedergegebenen Spektren folgende Experimente zugrunde liegen. Wird eine Mischung von C₆₀ und C₇₀ (C₆₀-Gehalt > 90%) durch Erhitzen auf 550 °C verdampft, durch Elektronen mit 70 eV ionisiert und die resultierenden Ionen auf 5000 eV kinetische Energie beschleunigt, erhält man unter Doppelfokussierungsbedingungen (m / Δm ≈ 1000, Ionendetektion an D2) durch Scannen von B1 (bei konstantem E1) über den Massenbereich m/z 714–734 den in Abbildung 2a dargestellten Ausschnitt des Molekülionenbereichs von C₆₀⁺.

Die C₆₀He⁺-Ionen werden durch Hochenergiestöße von C₆₀⁺ (E_{kin} = 5000 eV) mit quasistationären ⁴He-Targetatomen in C3 erzeugt (Transmission 40%). Da die Reaktion endotherm ist (ca. 27 eV als Resultat der „center of mass energy“ des C₆₀/He-Stoßkomplexes^[8, 9]), werden die zur Erzeugung von C₆₀⁴He⁺ eingesetzten C₆₀⁺-Ionen in der Ionquelle auf 5027 eV kinetische Energie beschleunigt, um den

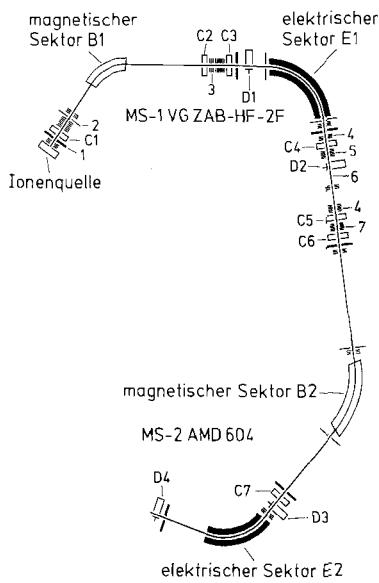


Abb. 1. Schematischer Aufbau des Berlin BEBE-Tandem-Massenspektrometers[13]. Stoßkammern C1–C7, Ionendetektoren D1–D4, variabler Spalt 1, fester Spalt 2, Ablenkungslinsen für den Ionenstrahl 3, Fokussierungs-/Bremslinsen 4, Fokussierungs-/Beschleunigungslinsen 5, Ende des MS-1-Geräts 6, Linsen zur Ablenkung und Beschleunigung des Ionenstrahls 7.

durch Kollision mit ${}^4\text{He}$ in der Stoßkammer C3 erzeugten $\text{C}_{60}^4\text{He}^{+*}$ -Teilchen das Passieren des auf 5 keV Ionen eingesetzten elektrostatischen Analysators E1 zu ermöglichen.

Bei Erhöhung der Beschleunigungsspannung und ${}^4\text{He}$ in Stoßkammer C3 erhält man bei ansonsten gleichen Bedingungen durch Scannen von B1 den in Abbildung 2b gezeigten Spektrenausschnitt; B1 läßt nach wie vor nacheinander sämtliche Isotopomere von C_{60}^+ hindurch. Aufgrund der kinetischen Energieverhältnisse können durch E1 jedoch nur daraus entstandene $\text{C}_{60}^4\text{He}^{+*}$ -Teilchen zum Detektor D2 gelangen. Unelastische Stöße von C_{60}^+ mit He, bei denen C_{60}^+ kinetische Energie verliert, ohne daß Helium angelagert wird, verursachen den diffusen Untergrund in Abbildung 2b.

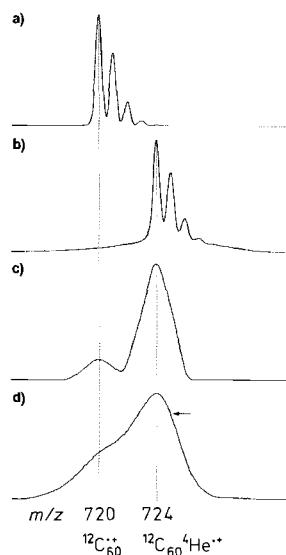


Abb. 2. Sequenz der Experimente (siehe Text für Details): a) Molekülionenbereich von ${}^{12}\text{C}_{60-x}{}^{13}\text{C}_x^+$ ($x = 0-4$), b) Erzeugen von ${}^{12}\text{C}_{60}\text{He}^{+*}$, c) „Reinigung“ von m/z 724, d) NR-Experiment von C_{60}^+ und $\text{C}_{60}\text{He}^{+*}$. Das Spektrum d wurde durch Aufsummieren von ca. 400 Spektren erhalten; pro Einzelspektrum wurden ca. 6.3 Ionen gezählt. Das Verhältnis der Zahl der Ionen in Abb. 2c/2d beträgt $6 \times 10^4 : 1$. Der Pfeil markiert das Recovery-Signal.

Dies wird durch das Spektrum in Abbildung 2c demonstriert: Unter den Bedingungen, die zum Spektrum in Abbildung 2b führen, wird B1 fest auf maximale Transmission von ${}^{12}\text{C}_{60}^+$ eingestellt (m/z 724 in Abb. 2b). Das E2 passierende Gemisch von ${}^{12}\text{C}_{60}^+$ (15%) und ${}^{12}\text{C}_{60}{}^4\text{He}^{+*}$ (85%) wird durch Scannen von B2 über den relevanten Bereich aufgetrennt. Die Feldstärken von E1 und E2 werden so gewählt, daß sie eine maximale Transmission für Ionen mit $E_{\text{kin}} = 5000$ eV haben; die Ionendetektion erfolgt an D4.

Für das NR-Experiment ist das Vorliegen des „Doublets“ in Abbildung 2c von enormem Vorteil, da das Signal für C_{60}^+ als Marker für die Massenzuordnung dient, und somit entfallen die bei Linked-scan-Methoden gelegentlich auftretenden Probleme einer präzisen Signalzuordnung. Um C_{60}^+ und $\text{C}_{60}\text{He}^{+*}$ einem Neutralisationsexperiment zu unterwerfen (Abb. 2d), wird das zum Spektrum in Abbildung 2c gehörende Experiment wie folgt durchgeführt. Um für die Elektronentransferprozesse einen möglichst hohen Wirkungsquerschnitt zu erzielen (Resonanzbedingung), wird ein Stoßgas verwendet, dessen Ionisierungsenergie (IE) möglichst nahe an derjenigen von C_{60} liegt ($\text{IE}(\text{C}_{60}) = 7.6$ eV^[14]). In vielen Versuchen zur Neutralisation von C_{60}^+ -Clustern^[15] hat sich für C_{60}^+ ($\text{CH}_3)_3\text{N}$ ($\text{IE} = 7.8$ eV^[16]) als beste Elektronenquelle erwiesen. Die Stoßkammer C5 wird mit $(\text{CH}_3)_3\text{N}$ beschickt, bis die Transmission des $\text{C}_{60}\text{He}^{+*}$ -Strahls auf ca. 10% absinkt; verbleibende Ionen wurden durch Anlegen einer Spannung von 1000 V an die Deflektorelektrode ausgeblendet, so daß nur ein Strahl von Neutralmolekülen in die Stoßkammer C6 eintritt. In dieser Zelle wird ein Teil des neutralen C_{60}He -Molekularstrahls durch Kollision mit quasistationärem $(\text{CH}_3)_3\text{N}$ reionisiert. Die für die stoßinduzierte Reionisierung erforderliche Energie wird der kinetischen Energie des m/z 724-Strahls entnommen; folglich mußte die Feldstärke von E2 geringfügig verringert werden, um m/z 724 mit maximaler Empfindlichkeit zu registrieren.

Daß erneut ein Signal (recovery signal) für C_{60}He im Massenspektrum (Abb. 2d) auftritt, ist eindeutig, und dieser Befund belegt zwingend die Existenz einer neutralen Spezies der Zusammensetzung C_{60}He ; für diese kommt aus bindungstheoretischen Überlegungen ausschließlich eine endohedrale Struktur $\text{He}@\text{C}_{60}$ in Frage. Es sollte nicht unerwähnt bleiben, daß $\text{He}@\text{C}_{60}$ die erste nachgewiesene Edelgas-Kohlenstoff-Verbindung ist^[17].

Da die Elektronentransferprozesse bei der Neutralisation und Reionisation vertikaler Natur sind^[18], belegt unter NR-Experiment auch für den kationischen Komplex eine endohedrale Struktur $\text{He}@\text{C}_{60}^+$. Da ferner HeC_{60}^+ in Gasphasenexperimenten mit den Edelgasfullerenen MC_x^+ ($\text{M} = \text{He}, \text{Ne}; x = 52-70$) die in Schema 1 beschriebenen Charakteristika gemeinsam hat, müssen auch diese Fullerene eine endohedrale Struktur haben^[19].

Eingegangen am 6. Dezember 1991 [Z 5059]

- [1] Neuere Übersichtsartikel: a) H. W. Kroto, *Science* **1988**, *242*, 1139; b) W. Weltner, Jr., R. J. Van Zee, *Chem. Rev.* **1989**, *89*, 1713; c) R. E. Smalley in *Atomic and Molecular Clusters*, (Hrsg.: E. R. Bernstein), Elsevier, Amsterdam, 1990, Kapitel 1; d) J. S. Miller, *Adv. Mater.* **1991**, *3*, 262; e) H. W. Kroto, A. W. Allaf, S. P. Balm, *Chem. Rev.* **1991**, *91*, 1213; f) R. F. Curl, R. E. Smalley, *Sci. Am.* **1991**, *32*; g) R. E. Smalley, *Large Carbon Clusters*, (Hrsg.: C. Hammond, V. Kuck), (ACS Symp. Ser. im Druck); h) H. W. Kroto, *Angew. Chem.*, im Druck.
- [2] J. M. Hawkins, A. Meyer, T. A. Lewis, S. Loren, F. J. Hollander, *Science*, **1991**, *252*, 312.
- [3] H. Hopf, *Angew. Chem.* **1991**, *103*, 1137; *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **1991**, *30*, 1117.
- [4] Für theoretische Arbeiten, siehe: a) A. Rosen, B. Wüstberg, *J. Am. Chem. Soc.* **1988**, *110*, 8701; b) J. Ciosowski, *ibid.* **1991**, *113*, 4139; c) J. Ciosowski, E. D. Fleischmann, *J. Chem. Phys.* **1991**, *94*, 3730; d) A. H. H. Chang,

- W. C. Ermler, R. M. Pitzer, *ibid.* **1991**, *94*, 5004; e) D. Bakewies, W. Thiel, *J. Am. Chem. Soc.* **1991**, *113*, 3704; f) B. Wästberg, A. Rosen, *Phys. Scr.* **1991**, *44*, 276; g) P. P. Schmidt, B. I. Dunlap, C. I. White, *J. Phys. Chem.*, eingereicht.
- [5] a) J. R. Heath, S. C. O'Brien, Q. Zhang, Y. Lin, R. F. Curl, H. W. Kroto, F. K. Tittel, R. E. Smalley, *J. Am. Chem. Soc.* **1985**, *107*, 7779; b) F. D. Weiss, J. L. Elkind, S. C. O'Brien, R. F. Curl, R. E. Smalley, *ibid.* **1988**, *110*, 4464; c) Y. Chai, T. Guo, C. Jin, R. E. Haufler, L. P. F. Chibante, J. Fure, L. Wang, J. M. Alford, R. E. Smalley, *J. Phys. Chem.* **1991**, *95*, 7564; d) J. H. Weaver, Y. Chai, G. H. Kroll, C. Jin, T. R. Ohno, R. E. Haufler, T. Guo, J. M. Alford, J. Conceicao, L. P. F. Chibante, A. Jain, G. Palmer, R. E. Smalley, *Chem. Phys. Lett.*, eingereicht.
- [6] D. M. Cox, D. J. Trevor, K. C. Reckmann, A. Kaldor, *J. Am. Chem. Soc.* **1986**, *108*, 2457.
- [7] a) L. M. Roth, Y. Huang, J. T. Schwedler, C. J. Cassaday, D. Ben-Amotz, B. Kahn, B. S. Freiser, *J. Am. Chem. Soc.* **1991**, *113*, 6298; b) Y. Huang, B. S. Freiser, *ibid.* **1991**, *113*, 9418.
- [8] a) T. Weiske, D. K. Böhme, J. Hrušák, W. Krätschmer, *Angew. Chem.* **1991**, *103*, 898; *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **1991**, *30*, 884; b) T. Weiske, J. Hrušák, D. K. Böhme, H. Schwarz, *Helv. Chim. Acta*, im Druck.
- [9] a) M. M. Ross, J. H. Callahan, *J. Phys. Chem.* **1991**, *95*, 5720; b) K. A. Caldwell, D. E. Giblin, C. S. Hsu, D. Cox, M. L. Gross, *J. Am. Chem. Soc.* **1991**, *113*, 8519; c) Z. Wan, J. F. Christian, S. C. Anderson, *J. Phys. Chem.*, eingereicht; d) K. A. Caldwell, D. E. Giblin, M. L. Gross, *J. Am. Chem. Soc.*, eingereicht; e) E. E. B. Campbell, R. Ehrlich, A. Hieltscher, J. M. A. Frazav, I. V. Hertel, *Z. Phys. D.*, im Druck; f) R. C. Mowrey, M. M. Ross, J. H. Callahan, *J. Phys. Chem.*, eingereicht.
- [10] Für Experimente zur Erzeugung von mehrfachgeladenen ($n+$)Fulleren-Edelgaskomplexen ($n = 2, 3$) siehe: a) T. Weiske, J. Hrušák, D. K. Bohme, H. Schwarz, *Chem. Phys. Lett.* **1991**, *186*, 459; b) T. Weiske, D. K. Bohme, H. Schwarz, *J. Phys. Chem.* **1991**, *95*, 8451.
- [11] Übersichten: a) C. Wesdemiotis, F. W. McLafferty, *Chem. Rev.* **1987**, *87*, 485; b) J. K. Terlouw, H. Schwarz, *Angew. Chem.* **1987**, *99*, 829; *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* **1987**, *26*, 805; c) H. Schwarz, *Pure Appl. Chem.* **1989**, *61*, 685; d) J. L. Holmes, *Adv. Mass Spectrom.* **1989**, *11*, 53; e) J. K. Terlouw, *ibid.* **1989**, *11*, 984; f) J. L. Holmes, *Mass Spectrom. Rev.* **1989**, *8*, 513; g) F. W. McLafferty, *Science* **1990**, *247*, 990.
- [12] Für Spekulationen und „Experimente“, daß Kohlenstoff-Cluster (nicht weiter präzisierter Struktur) als Träger für Edelgase – vermutlich auch im interstellaren Raum – fungieren können, siehe: a) R. S. Lewis, B. Srinivasan, E. Anders, *Science* **1975**, *190*, 1251; b) S. Niemeyer, K. Marti, *Proc. Lunar Planet. Sci.* **1981**, *12B*, 1177; c) D. Heymann, *J. Geophys. Res. B* **1986**, *91*, E135.
- [13] Für eine detaillierte Beschreibung, siehe: a) R. Srinivas, D. Sülzle, T. Weiske, H. Schwarz, *Int. J. Mass Spectrom. Ion Processes* **1991**, *107*, 369; b) R. Srinivas, D. Sülzle, W. Koch, C. H. DePuy, H. Schwarz, *J. Am. Chem. Soc.* **1991**, *113*, 5970.
- [14] a) D. L. Lichtenberger, K. W. Nebesny, C. D. Ray, *Chem. Phys. Lett.* **1991**, *176*, 203; b) J. A. Zimmermann, J. R. Eyler, S. B. H. Bach, S. W. McElvany, *J. Chem. Phys.* **1991**, *94*, 3556.
- [15] T. Wong, T. Weiske, J. K. Terlouw, H. Schwarz, *Int. J. Mass Spectrom. Ion Processes*, im Druck.
- [16] S. G. Lias, J. E. Bartmess, J. F. Liebman, J. L. Holmes, R. D. Levin, W. G. Mallard, *J. Phys. Chem. Ref. Data* **1988**, Supplement 1.
- [17] G. Frenking, D. Cremer, *Struct. Bonding (Berlin)* **1990**, *73*, 17, zit. Lit.
- [18] a) P. Fournier, J. Appell, F. C. Fehsenfeld, J. Durup, *J. Phys. B* **1972**, *5*, L58; b) F. C. Fehsenfeld, J. Appell, P. Fournier, J. Durup, *ibid.* **1973**, *6*, L268; c) J. C. Lorquet, B. Ley-Nihant, F. W. McLafferty, *Int. J. Mass Spectrom. Ion Processes* **1990**, *100*, 465.
- [19] Zum ersten Mal vorgetragen: H. Schwartz, *Workshop on Fullerene Clusters*, Riso National Laboratory, Roskilde (Dänemark), 6.–7. Dezember 1991.

BUCHBESPRECHUNGEN

Buchbesprechungen werden auf Einladung der Redaktion geschrieben. Vorschläge für zu besprechende Bücher und für Rezessenten 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.

Quanta. A Handbook of Concepts. 2. Auflage. Von P. W. Atkins. Oxford University Press, Oxford, 1991. 434 S., geb. £ 50.00. – ISBN 0-19-855572-5; Broschur, £ 25.00. – ISBN 0-19-855573-3

Daß es sich bei diesem Buch um kein gewöhnliches Lehrbuch handelt, erfährt der Leser schon dann, wenn er vergeblich nach dem Inhaltsverzeichnis sucht. Die Konzepte der Quantenmechanik sind in viele leichtverdauliche Häppchen zerlegt, die, alphabetisch sortiert, von „Ab initio“ über „Frontier orbitals“ und „Ligand field theory“ bis zu „Zero point energy“ reichen. Die Größe der Kapitel reicht von einigen Zeilen (z. B. „Rydberg level“) bis zu mehreren Seiten (z. B. „Molecular orbital theory“). Mathematische Formeln

wurden aus dem laufenden Text weitgehend verbannt. Dort, wo sie wirklich unvermeidlich sind, z. B. bei den Begriffen „Laplacian“ und „Overlap integral“, sind Formeln in farblich abgesetzten Kästchen untergebracht. Atkins ist für den didaktisch klaren Aufbau und die hervorragende Illustration seiner Lehrbücher bekannt, und auch hier wird man nicht enttäuscht. Es ist erstaunlich, wie es der Autor versteht, mit einfachen graphischen Hilfsmitteln komplexe Sachverhalte darzustellen. So werden die Grundlagen der Quantenmechanik auf vorwiegend visuelle Art erläutert, was dem die Bildersprache der Chemie gewohnten Chemiker sehr entgegenkommt (siehe R. Hoffmann, P. Laszlo, *Angew. Chem.* **1991**, *103*, 1). Querverweise auf andere Kapitel des Buches ermöglichen eine schnelle Einarbeitung in einen Themenkomplex. Allerdings ist eine gewisse Vertrautheit mit den Grundbegriffen der Quantenmechanik nützlich – aber nicht Voraussetzung –, um den roten Faden bei der Suche nach Begriffen nicht zu verlieren. Und schließlich wird der Inhalt des Buches auch gezielt über ein umfangreiches Register erschlossen.

Sehr hilfreich sind die Abschnitte „Further information“ am Ende jedes Kapitels. Statt einer umfangreichen Literatursammlung, die häufig nur mit Mühen zu erschließen ist, wird mit einem kurzen Kommentar auf weiterführende Literatur hingewiesen. Dies ermöglicht die gezielte Literatursuche entsprechend dem Kenntnisstand des Lesers.

Kleine Fehler wurden in der vorliegenden zweiten Auflage weitgehend behoben. Im Kapitel „Alternant hydrocarbon“ wird Propen an Stelle des Allylradikals als Beispiel aufgeführt. Die Orbitalbilder im Kapitel „Woodward-Hoffmann rules“ sind recht unanschaulich im Vergleich zu den Darstellungen in anderen Lehrbüchern. Aber letztendlich ist die Präsentation ja auch Geschmacksache.