

nalliteratur. Auch wenn einige Beispiele aufgrund der raschen Entwicklung schnell überholt sein dürften, wird die gelungene Wiedergabe der grundsätzlichen Ansätze und experimentellen Methoden dieses Buch zu einer nützlichen Investition für diejenigen machen, die an den zukünftigen Möglichkeiten der NMR-Mikroskopie interessiert sind.

Jens Frahm  
Max-Planck-Institut  
für Biophysikalische Chemie  
Göttingen

**Properties of Chemically Interesting Potential Energy Surfaces.** (Reihe: Lecture Notes in Chemistry, Vol. 56.) Von D. Heidrich, W. Kliesch und W. Quapp. Springer, Berlin, 1991. VIII, 183 S., Broschur 44.00 DM. – ISBN 3-540-54286-8

Die Berechnung von Molekülstrukturen mit quantenchemischen Rechenprogrammen ist fast schon zur Routine in der modernen Theoretischen Chemie geworden. Die verführerische Stärke dieser Rechenverfahren liegt darin, nicht nur Energieminima auf der Potentialhyperfläche (PHF) zu ermitteln, die mit experimentellen Werten verglichen und zunehmend als deren Ersatz benutzt werden, sondern beliebige andere Extremwerte wie etwa Sattelpunkte erster Ordnung zu bestimmen, die als Karikatur eines Übergangszustandes dem Chemiker eine experimentell nicht zugängliche Information liefern. Der vorliegende Band 56 aus der schönen Reihe „Lecture Notes in Chemistry“ gibt einen Überblick über die mathematischen Grundlagen der Berechnung von Potentialhyperflächen. Dabei stehen die Diskussion der Suchverfahren für Extremwerte und die Bestimmung von Reaktionswegen auf der PHF im Vordergrund. Als Anwendungsbeispiel wird der Protonentransfer detailliert vorgestellt.

Das Buch ist in vier Kapitel aufgeteilt; im ersten (25 S.) wird das Konzept der PHF diskutiert. Dieses Kapitel kann jedem Leser empfohlen werden, der an einer kurzen Einführung in den augenblicklichen Stand der Diskussion über das Modell der Molekülstruktur und der PHF interessiert ist und einen Überblick über die wichtigsten Literaturstellen sucht. Die Molekülstruktur im herkömmlichen Sinn setzt ja die Gültigkeit der Born-Oppenheimer-Näherung voraus, die im allgemeinen als selbstverständlich angenommen wird. Es mehren sich Hinweise auf Systeme wie etwa  $\text{NH}_3$ , die die Grenzen dieser Näherung deutlich machen. Die Autoren schlagen eine kritische Überprüfung der Born-Oppenheimer-Näherung vor und halten eine grundsätzliche Veränderung im Verständnis von Molekülstrukturen für möglich. Mit diesen etwas ketzerischen Bemerkungen lassen sie es bewenden, der Rest des Buches bewegt sich durchaus im traditionellen Born-Oppenheimer-Bild. Das erste Kapitel wird durch einige grundsätzliche Ausführungen über die theoretische Behandlung von chemischen Reaktionen abgeschlossen.

Das zweite und das dritte Kapitel (66 bzw. 35 S.) sind der mathematischen Seite der Thematik gewidmet. Zwei der drei Autoren (Kliesch und Quapp) sind Mathematiker, und diese beiden Abschnitte sind im wesentlichen eine Zusammenfassung der mathematischen Grundlagen der in vielen quantenchemischen Rechenverfahren benutzten Optimierungsverfahren. Dieser Teil des Buches ist für den Spezialisten der wichtigste und deswegen sehr wertvoll, weil es eine solche umfassende Darstellung etwa der Techniken für das Update der Hesse-Matrix sonst nirgendwo gibt. Die Grundlagen der quantenchemischen Methoden finden sich in vielen

Lehrbüchern, aber die mathematischen Details der aktuellen Rechenprogramme sind häufig nur schwer zu finden. Diese beiden Kapitel sind notwendigerweise in der Sprache eines Mathematik-Lehrbuchs gehalten. Nach einer kurzen Eingewöhnungsphase waren die meisten Ableitungen aber vom Rezensenten ohne größere Schwierigkeiten nachzuvollziehen. Den Autoren gebührt auch ein Lob für die deutlichen Bemühungen, die mathematischen Ausdrücke in chemische, zumindest graphisch darstellbare Größen zu kleiden und den Zusammenhang mit der chemischen Problematik nicht zu verlieren. Vielleicht zeigt sich hier der Einfluß des Chemikers unter den Autoren (Heidrich).

Das abschließende vierte Kapitel (38 S.) ist der Berechnung von Potentialhyperflächen und Reaktionswegen beim Protonentransfer gewidmet, wobei auch hier der Frage der Visualisierung der numerischen Ergebnisse besondere Aufmerksamkeit geschenkt wird. Chemiker sind zum Leidwesen mancher Theoretiker eher graphisch denn numerisch ansprechbar, und es ist immer wieder zu beobachten, daß einer fragwürdigen Abbildung mehr Aufmerksamkeit geschenkt wird als einer guten numerischen Berechnung, die schwierig zu interpretieren ist. Auf dem modischen Fachgebiet „Molecular Modeling“ gibt es genügend abschreckende Beispiele. Hier gelingt den Autoren der schwierige Brückenschlag recht gut; das vierte Kapitel ist für den Normalchemiker nicht nur lesbar, sondern sehr lebenswert.

Das Buch ist ein Muß für jeden theoretisch orientierten Chemiker, ansonsten können das erste und das letzte Kapitel jedem Chemiker empfohlen werden. Unbedingt aber sollte das Buch in jeder Institutsbibliothek zu finden sein. Der erfreulich günstige Preis von 44.00 DM läßt dies auch in Zeiten von hohen Sparforderungen zu.

Gernot Frenking  
Fachbereich Chemie  
der Universität Marburg

**Semiclassical Mechanics with Molecular Applications.**

(Reihe: International Series of Monographs in Chemistry, Vol. 25.) Von M. S. Child. Oxford Science Publications, Clarendon Press, Oxford, 1991. X, 417 S., geb. 50.00 £. – ISBN 0-19-855654-3

Um es vorwegzunehmen: Childs Monographie über semiklassische Mechanik mit molekularen Anwendungen ist das – längst überfällige! – Buch für theoretisch orientierte Chemiker und Molekülphysiker, die das immer wieder aktuelle Grenzgebiet zwischen klassischer Mechanik und Quantenmechanik auf hohem, modernem Niveau kennenlernen und möglicherweise auch anwenden möchten. Es behandelt nämlich nicht nur die traditionellen Domänen der Semiklassik, z.B. Bohrs Atom-Modell, das Landau-Zener-Modell für diabatische Übergänge, den Zusammenhang zwischen quantenmechanischer Wellenfunktion und klassischen Trajektorien nach Jeffreys, Wentzel, Kramers und Brillouin (JWKB), die Quantisierung nicht-separabler Systeme nach Einstein, Brillouin und Keller (EBK) und das Verfahren von Rydberg, Klein und Rees (RKR) zur spektroskopischen Bestimmung von Molekül-Potentialkurven. Vielmehr werden auch die bedeutenden neuen Entwicklungen und Anwendungen der Semiklassik gebracht, die bisher kaum in anwendungsorientierten Lehrbüchern zu finden sind, z.B. die Problematik der Quantisierung von klassisch chaotischem Verhalten, die Klassifizierung semiklassischer Näherungsverfahren nach der Katastrophentheorie, die modernen semiklassischen Theorien zur molekularen Reaktionsdynamik nach Marcus, Miller und anderen sowie schließlich der revolutionäre zeit-