

abhängige Zugang zu Dynamik und Spektroskopie mit Hilfe Gaußscher Wellenpakete nach Heller. Kurzum: Child bietet in Sachen Semiklassik so ziemlich alles, was das Herz begeht, und zwar in klarer Gliederung, mit ca. 500 treffsicher ausgewählten Referenzen und mit hilfreichen Autoren- und Schlagwort-Verzeichnissen.

Kritik ist trotzdem angesagt. Einmal ist das Niveau der Darstellung allzu heterogen: Es reicht – je nach Teilgebiet – von elementarer Einführung für Student(innen) bis zum augenzwinkernden Hinweis für/unter Expert(innen). Dazu nur ein Beispiel: Kapitel 11 „Wavepackets“ beginnt mit einer recht detaillierten Darstellung von Hellers Wellenpaketen und ihrer Beschreibung durch teils klassische (Trajektorien), teils quantenmechanische (Dispersion, Kohärenz, Interferenz) Begriffe und Parameter. Ein(e) motivierte(r) Student(in) wird sich da mit einem Einsatz auf ca. zehn Seiten die Grundlagen für wichtige, aktuelle Forschungsgebiete erobern können; außerdem wird der zugehörige Schlüssel zur Originalliteratur geboten. Aber dann setzt's aus: Auf vier Seiten folgt die Darstellung zugehöriger Anwendungen in Spektroskopie und Molekularer Reaktionsdynamik (Kapitel 11.4 „Franck-Condon transitions, Raman Spectroscopy, and Photodissociation“) – letztere ohne ein einziges Beispiel (... und wieviel wunderschöne gäbe es!), und alles so, daß dem/der unvorbereiteten Leser(in) die entscheidenden Grundgleichungen ohne weitere Begründung vorgesetzt werden. Eine zweite Schwäche des Buches sehe ich darin, daß streckenweise Beispiele aus der Originalliteratur referiert werden, ohne sie in den für eine Monographie angemessenen größeren Zusammenhang zu stellen. Wieder ein Beispiel: In Kapitel 7.3 „Uniform quantization at a resonance“ wird das System gekoppelter Morse-Oszillatoren in Wirkung-Winkel-Variablen semiklassisch behandelt, ohne den Bezug zum Modell von Thiele und Wilson für Molekülschwingungen konkret herzustellen; da hätte man sich schon eine Übersetzung der heute üblichen Darstellungen von lokalen, normalen und hypersphärischen Schwingungsmoden gewünscht. Die dritte Kritik: Stellenweise ist Childs Abhandlung „leicht schlampig“. Nicht nur, daß etliche Autoren falsch buchstabiert werden (Beidenharn, Engleke, Romelt etc.) – schlimmer ist die wiederholte Übernahme von Abbildungen oder gar von Modellen aus der Originalliteratur ohne die allemal erforderliche sorgfältige Einbindung mit detaillierten Bildlegenden, Achsenbeschriftung und -skalierung, Angabe des zugrundeliegenden Modell-Hamilton-Operators etc. Die letzte kritische Anmerkung schließlich ist eher grundsätzlich: In seinem Buch geht Child konkret nie über ein- oder zweidimensionale Anwendungsbeispiele hinaus, abgesehen von seltenen Hinweisen auf höherdimensionale Systeme in der Originalliteratur. Das mag didaktisch verständlich sein – man beginne mit dem Einfachen. Trotzdem: gerade Student(innen) werden sich vor dem voraussichtlich aufwendigen Durchackern der streckenweise hochanspruchsvollen semiklassischen Theorie fragen, ob denn der Aufwand lohnen wird, wenn es doch heute möglich ist, die von Child vorgestellten Modellsysteme von vornherein mit quantenmechanischen Verfahren numerisch akkurat und durchaus auch anschaulich zu behandeln. Child ist es sicher gelungen, vielfach überzeugend darzustellen, wie semiklassische Theorien molekulare Phänomene erklären können. Andererseits entgeht er nicht der Versuchung gelegentlicher Formelorgien, die nur noch die ganz Eingeweihten schön finden können. Was fehlt, ist meines Erachtens eine klar begründete Zukunftsperspektive, z.B. „Semiklassik läßt hoffen, die Dynamik und Spektroskopie komplexer, hochdimensionaler molekularer Systeme adäquat zu beschreiben, die mit rein quantenmechanischen Methoden absehbar unzugänglich bleiben werden.“ Aber ist das wirklich so?

Fazit: Childs Monographie ist ein Muß für Bibliotheken von theoretisch orientierten Chemiker(inne)n und Molekülephysiker(inne)n. Es gibt nichts annähernd Vergleichbares für dieses aktuelle Gebiet. Man muß das Buch dann halt kritisch lesen.

Jörn Manz

Institut für Physikalische
und Theoretische Chemie
der Freien Universität Berlin

Enantioselective Synthesis. Natural Products from Chiral Terpenes. Von Tse-Lok Ho. Wiley, Chichester, 1992. XII, 324 S., geb. 56.00 £. – ISBN 0-471-54819-7

Das vorliegende Buch behandelt ein wichtiges klassisches Teilgebiet der Synthese von Enantiomeren statt Racematen, nämlich Naturstoffsynthesen ausgehend von natürlichen Materialien mit möglichst hoher Enantiomerenreinheit – the chiral pool – hier Terpene. Das Essentielle dabei ist natürlich, daß die Chiralität und Enantiomerenreinheit des jeweiligen Bausteins in das Endprodukt übertragen wird.

Im Vorwort heißt es, „...there is an apparent lack of a comprehensive summary of terpene-based syntheses“, und einen Satz später, „...consequently it seems worthwhile to collate and discuss the important contributions in this area“. Nun ist es ganz offensichtlich unmöglich, die gesamte, wirklich sehr umfangreiche Literatur zu diesem Thema in einem relativ dünnen Buch wie diesem zu behandeln. Es muß also eine Auswahl getroffen werden sein, aber es bleibt dem Leser überlassen, herauszufinden, welche. Im Grunde ist das die einzige wesentliche Kritik, die ich habe. Der Autor definiert nirgends den Rahmen seines Buches.

Die getroffene Auswahl ist zunächst folgende: Es werden meist vielstufige Synthesen vorgestellt und kommentiert, aber fast ohne irgendwelchen Hintergrund. Weiter sind die Ausgangsprodukte fast ausschließlich Monoterpen (citronellene, citronellol, linalool, oxidized derivatives; limonene; menthone, piperitone, perilla aldehyde and related compounds; pulegone; carvone; carenes and thujone; pinenes; camphor and congeners; other terpenes). Das Kapitel über Campher beispielsweise enthält ungefähr 50 Referenzen, der Übersichtsartikel von Money über Campher, der zitiert wird, dagegen 240 Primärreferenzen, wovon viele noch multiple Literaturstellen enthalten. Der Unterschied kommt daher, daß der Übersichtsartikel nicht nur Synthesen im Sinne des vorliegenden Buches behandelt, sondern auch die ganze klassische Chemie, die die Funktionalisierung des Campfers überhaupt erst ermöglicht, während im Buch diese Chemie nur ganz kuriosisch erwähnt wird und ohne Hinweise, wie man an sie herankommt („...a thorough knowledge of its (des Campfers) chemistry is most critical [Money, 1985].“).

Die Vollständigkeit der behandelten Synthesen ist schwerer zu beurteilen. Wir haben wieder die Campher ausgewählt und eine Computer-on-line-Suche in den *Chemical Abstracts* gemacht, und fast alles, was wir dabei fanden, ist im Buch behandelt. Andererseits habe ich mit einer unserer Listen von Publikationen verglichen, die für die Riechstoffindustrie von Bedeutung sind, und davon ist nur ein Bruchteil erfaßt. „Comprehensive“ ist die Behandlung also nicht, aber meines Erachtens ist eine gute Auswahl getroffen worden.

Das Buch enthält insgesamt ungefähr 450 Literaturzitate, und zwar fast ausschließlich Primärliteratur. Daneben finden sich ein paar Doktorarbeiten, Abstracts aus ACS-Meetings, Privatmitteilungen und zwei Bücher, nämlich „The Terpenes“ von Simonsen und „Polarity Control“ des Autors. Der Simonsen wird in der Einführung als Standardwerk

über Terpenchemie empfohlen. Das stimmt auch immer noch, aber er stammt aus den fünfziger Jahren. Wenn man ihn schon erwähnt, dann sollte man wenigstens auch eine Auswahl aus der großen Zahl von modernen Handbüchern anführen, z. B. „Chemistry of the Monoterpene; an Encyclopedic Handbook“ von Erman (1985). Bücher, die ähnliche Ziele haben wie das vorliegende, so das unumgängliche fünfbändige Standardwerk „Asymmetric Synthesis“ von Morrison und Scott (1983–1985), „Total Synthesis of Natural Products: The Chiron Approach“ von Hanessian (1983) und „The Logic of Chemical Synthesis“ von Corey und Cheng (1989), werden nicht erwähnt. Coreys „logic-centered methodology“ wird statt dessen mit dem *Science*-Artikel von Corey und Wipke aus dem Jahr 1969 belegt. Aus dem Buch von Corey und Cheng stammt das Wort carbogen („During the last fifty years complex carbogen synthesis has extended its frontier to near the conceivable limit.“). Damit verwandt ist das Wort chirogen (Neologismus? „Camphor is an excellent chirogen...“), das sinngemäß nicht einer früheren Definition von Eschenmoser entspricht (Chirogenie, *Helv. Chim. Acta* 1990, 73, 1373). Beide Begriffe werden ohne Erklärung verwendet. Einige wenige Übersichtsartikel wie der erwähnte von Money über die Campher und einer von Lythgoe sind im Text nicht als solche erkennbar. Der Literaturschlüsse ist nicht angegeben. Das Gros der Referenzen stammt aus den achtziger Jahren. Es gibt eine Referenz aus dem Jahr 1958 und fünf aus dem Jahr 1991, keine davor oder danach.

Kehren wir zum Inhalt des Buches zurück, den die besprochenen Referenzen natürlich spiegeln. Schätzungsweise um 350 Synthesen (!) sind wie heute üblich mit Formeln, Pfeilen, Buchstaben und Fußnoten zusammengefaßt. Die Formeln sind gut gezeichnet und meistens nicht gekennzeichnet (keine Nummern oder Buchstaben), wenn doch, vor allem bei den Endprodukten, dann mit Namen. Die Schemata sind ebenfalls nicht gekennzeichnet, aber da eingefügt, wo von ihnen die Rede ist. Der Text besteht aus knappen, manchmal vielleicht zu knappen Analysen („Space is devoted therefore mostly to strategic considerations and unusual observations“) in einer recht eigenwilligen Sprache, aber das ist Neben- oder Geschmackssache. Hier hat sich der Autor sehr viel Mühe gemacht. Das ganze, Bild und Text, sind gut integriert, und man bekommt wirklich einen sehr guten Überblick.

Aber auch in bezug auf das Register und einige essentielle Informationen ist eine sehr knappe und dazu zum Teil willkürliche und uneinheitliche Auswahl getroffen worden. Weiter ist die Art, im Text zu zitieren, und die Form der Literaturzitate unpraktisch und zudem verschieden von dem, was in der chemischen Literatur üblich ist. Es gibt ein vierseitiges Verzeichnis der behandelten synthetisierten Verbindungen [von Achillin über Cornorsterone, (+)-7,8-Epoxy-2-basmen-6-one, Estrone, *ar*-Himachalene, Nootkatone, Sex pheromone (banded cucumber beetle, California red scale, corn rootworm, stink bug, yellow scale) bis Zonarene], aber weder ein Verzeichnis der Ausgangsprodukte noch ein Autorenverzeichnis. Die Ausgangsprodukte findet man mehr oder weniger schnell über das Inhaltsverzeichnis. Bei der Suche nach den Korrespondenzautoren hilft das fünfzehnseitige Literaturverzeichnis am Ende des Buches wenig, denn erstens sind die Eintragungen alphabetisch nach dem ersten Autor geordnet und zweitens kann man nicht in den Text zurückgehen (keine Seitenzahlen!), weil im Text der erste Autor mit dem Erscheinungsjahr zitiert ist. Autoren oder Forschungsgruppen werden mit einigen Ausnahmen nur über diese Zitate identifiziert.

Die optischen Reinheiten („optical purity“) der Ausgangsprodukte werden nur zum Teil qualitativ definiert

(„not of high optical purity“). Besser wäre es, von den Enantiomerenreinheiten („enantiomeric purity“) zu sprechen, da diese ausschlaggebend sind und da zudem parallel zur optischen Reinheit der Begriff enantiomerenrein („enantiomerically pure“) verwendet wird. Es werden nur zum Teil $[a]_D$ -Werte angegeben und noch dazu ohne Angabe des Lösungsmittels und der Temperatur [„(R)-pulegone, $[a]_D + 23^\circ$, has found frequent service in synthesis due to its optical purity...“]. Die Chiralitäten der Ausgangs- und Endprodukte werden uneinheitlich definiert [(-)-camphor, (R)-(+)pulegone, (+)-luciduline, β -elemenone, *ent*-occidentallol]. Es gibt nahezu keine Literaturangaben bezüglich der Enantiomerenreinheiten, $[a]_D$ -Werte und Chiralitäten. Preise werden manchmal qualitativ erwähnt („The cost of (-)-carvone is much less than that of the (+)-isomer.“), (R)-(+)Limonene, $[a]_D + 126.8^\circ$, is probably the most abundant and cheapest enantiomerically pure cyclic olefin available from natural sources.“).

Schließlich ist zumindest der erste Titel des Buches irreführend. Enantioselektiv ist zunächst ein Schritt innerhalb einer Synthesesequenz, die mehr oder weniger bevorzugt zu einem Enantiomer führt, z. B. eine enantioselektive Hydrierung eines prochiralen Substrats (nach Eschenmoser ein chirogener Schritt), und dann auch die ganze Sequenz. Behandelt wird etwas anderes, wie im zweiten Titel belegt wird, aber auch Racemate sind chiral.

Valentin Rautenstrauch
Firmenich SA, Genf

Graphics and Animation in Surface Science. Herausgegeben von D. D. Vvedensky und S. Holloway. Adam Hilger, Bristol (UK), 1992. VIII, 117 S., geb. 27.50 £. – ISBN 0-7503-0188-X

Schon seit vielen Jahren ist der Computer in der experimentellen Naturwissenschaft für Datenerfassung und -auswertung, aber auch bei der Erstellung der Manuskripte und Verbreitung der wissenschaftlichen Resultate völlig unverzichtbar. In jüngster Zeit gewinnt jedoch eine weitere Art der Computernutzung zunehmend an Bedeutung, die *Computergraphik*, welche die gewonnenen Daten nicht nur geschickt und optisch ästhetisch präsentiert, sondern mit deren Hilfe man vielfach auch erst auf bestimmte naturwissenschaftliche Zusammenhänge aufmerksam wird. Beispielsweise kann man sehr rasch ablaufende Prozesse zeitlich verzögert darstellen und damit Zwischenstadien überhaupt erst einer Beobachtung zugänglich machen; umgekehrt lassen sich sehr langsame Prozesse in einer schnellen Bildsequenz präsentieren, aus der dann die interessierenden Effekte viel deutlicher hervorgehen.

Wie vorteilhaft der Einsatz derartiger Computergraphik sein kann, läßt sich besonders gut am Beispiel der Oberflächenphysik und -chemie demonstrieren, und diesem Zweck dient der vorliegende Band, in dem die Herausgeber sieben Einzelbeiträge zu computertechnischen Fragen, vor allem aber zu unterschiedlichen Gebieten der Oberflächenphysik zusammengestellt haben, bei denen es ohne adäquate Computergraphik und -animation kaum gelungen wäre, die zum Teil sehr spektakulären Ergebnisse zu erhalten.

Das Buch wird mit einer allgemeinen Einführung der Herausgeber eröffnet, wobei unter anderem der Einsatz von grafischen Methoden bei ab-initio-Gesamtenergieberechnungen, bei der Beschreibung molekulardynamischer Vorgänge, bei Monte-Carlo-Simulationsrechnungen sowie bei Oberflächenreaktionen hervorgehoben wird.