

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 Monoterpenes; an Encyclopedic Handbook“ von Erman (1985). Bücher, die ähnliche Ziele haben wie das vorliegende, so das unumgängliche fünfbandige 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 erkenntlich. Der Literaturschluß 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 Corrinsterone, (+)-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 fünfzehnte 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*-occidentolol]. 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 graphischen Methoden bei ab-initio-Gesamtenergieberechnungen, bei der Beschreibung molekulardynamischer Vorgänge, bei Monte-Carlo-Simulationsrechnungen sowie bei Oberflächenreaktionen hervorgehoben wird.

Im zweiten Kapitel beschreibt N. M. Harrison in knapper Form die Benutzung von Hochleistungsgraphik-Rechnern in der Oberflächenforschung und geht dabei vor allem auf technische Fragen der Computerauswahl (Hardware und Software), auf Probleme der Erstellung von reproduktionsfähigen Ausdrucken („hardcopies“) sowie auf mögliche Anwendungen bestimmter Graphik-Benutzerpakete in der Oberflächenphysik ein.

Das dritte Kapitel von O. H. Nielsen heißt „Animation in Surface Science“. Nun wird der nicht unmittelbar mit dem Themenkreis des Buches vertraute Leser mit dem englischen Wort „animation“ Schwierigkeiten haben – das Wörterbuch gibt als Übersetzung „Beseelung, Belebung“ an, was auf den wissenschaftlichen Hintergrund bezogen bedeutet, daß physikalische Resultate, die in tabellarischer Form oder in zweidimensionaler Darstellung unübersichtlich oder möglicherweise gar unverständlich sind, sich erst durch eine geeignete mehrdimensionale Repräsentation und/oder eine kolorierte Bildfolge (movie) dem Verständnis erschließen. Als Beispiel aus der Oberflächenphysik wird die perspektivische Wiedergabe einer Festkörperoberfläche gewählt, um den Nutzen der Computeranimation zu veranschaulichen; im weiteren Verlauf des Beitrags werden dann vor allem computertechnische Fragen der Animation diskutiert.

Eine speziellere Thematik wird von M. W. Rickets im vierten Kapitel aufgenommen, nämlich die Beschreibung des bekannten Programmpaketes WINSOM und seine Anwendung auf ausgewählte naturwissenschaftliche Probleme, etwa Moleküldarstellung (Molecular Modeling), Flüssigkristalle sowie Potentialfelder und komplexere biologische Strukturen.

Für den Oberflächenphysiker besonders interessant erscheint das Kapitel 5 von P. Stoltze, welches den großen Nutzen von Graphik und Animation bei der Simulation molekuldynamischer Vorgänge unterstreicht. Hier geht es unter anderem darum, die Ergebnisse von entsprechenden Rechnungen graphisch zu veranschaulichen. Ein besonders gutes Beispiel ist die Darstellung der Bewegungen (Trajektorien) von miteinander wechselwirkenden Atomen oder Molekülen über einen längeren Zeitraum (etwa in einer Flüssigkeit oder in einem schmelzenden Kristall). Nicht zuletzt haben derartige Graphiken sehr zum Verständnis von Kristallwachstum, vorankündigenden Schmelzerscheinungen (premelting) und Aufrauungsübergängen (roughening transitions) beigetragen.

Im sechsten Kapitel „Animation of Large-Scale Simulations“ konzentrieren sich M. R. Wilby und S. Clarke auf die graphische Darstellung von Monte-Carlo-Simulationen des (technisch außerordentlich wichtigen) Prozesses der Molekularstrahlepitaxie (molecular beam epitaxy, MBE). Wie in Kapitel 5 geht es auch hier letztlich darum, die Trajektorien der aufwachsenden Atome über einen bestimmten Zeitabschnitt in Abhängigkeit von den (anisotropen) Wechselwirkungsenergien mit dem Substrat zu erfassen und dann geeignet abzubilden, um die makroskopisch in Erscheinung tretenden Wachstumsvorgänge zu verdeutlichen.

Das Buch endet mit dem Beitrag „Animation of Quantum Scattering Events using Hypercard“ von D. M. Halstead und S. Holloway, in dem das theoretische Problem der Quantenstreuung an Potentialbarrieren, das für die Berechnung von Trajektorien z.B. adsorbierender Moleküle bedeutsam ist, erläutert und auf Probleme der graphischen Darstellung der theoretischen Ergebnisse eingegangen wird.

Einige wenige kritische Anmerkungen vorweg: Der relativ allgemein gehaltene Titel des Buches verspricht dem unvoreingenommenen Leser eine Momentaufnahme der gesamten Computeranimation in der Oberflächenforschung – ein Blick auf den relativ bescheidenen Umfang des Bändchens

belehrt ihn dann allerdings sofort, daß es sich nur um eine kleine Auswahl von Themen oder Anwendungen handeln kann. So sind dem Rezensenten mehrere außerordentlich nützliche Graphik- und Animationsprogramme etwa zur Darstellung von Oberflächen- und Adsorbatstrukturen oder zur Sichtbarmachung von Gitterschwingungen (Volumen- und Oberflächenphononen) bekannt, welche in das vorliegende Buch nicht mitaufgenommen wurden; ebenso wird die Erwähnung von Programmen vermißt, welche sich mit Aufbereitung und Darstellung von Rastertunnelmikroskop-Bildern befassen, dem gegenwärtig wohl ergiebigsten und aktuellsten Gebiet der Oberflächenphysik. Dennoch – die Herausgeber haben das Wagnis auf sich genommen, ein in stürmischer Entwicklung befindliches Gebiet einem größeren Leserkreis zugänglich zu machen, und nicht nur dieser Versuch, sondern auch das Ergebnis ist sehr begrüßenswert. Jeder Physiker und Chemiker, der sich mit Computeranimation in der Oberflächenforschung vertraut machen will, sollte sich das Bändchen anschaffen, auch auf die Gefahr hin, daß Teile seines Inhalts bereits in wenigen Jahren von der Computerentwicklung überholt sein mögen. Der sehr erschwingliche Preis bei guter Buchausstattung (vor allem die zahlreichen farbigen Abbildungen sind erwähnenswert) kann ebenfalls *animierend* wirken.

Klaus Christmann

Institut für Physikalische und Theoretische Chemie
der Freien Universität Berlin

Molekülphysik und Quantenchemie. Einführung in die experimentellen und theoretischen Grundlagen. Von H. Haken und H. C. Wolf. Springer, Berlin, 1992. XVI, 416 S., geb. 68.00 DM. – ISBN 3-540-54269-9

Mit diesem Buch stellen die beiden Autoren ein Lehrbuch der Molekülphysik vor, das vor allem fortgeschrittenen Studenten der Physik das notwendige Grundwissen in diesem Gebiet vermitteln soll. Die Aufnahme des Begriffs Quantenchemie in den Titel zeigt jedoch, daß auch an Studenten der Physikalischen Chemie und der Theoretischen Chemie gedacht ist. Dabei ist das vorliegende Buch in gewisser Weise eine Fortsetzung des früher von denselben Autoren verfaßten Bandes „Atom- und Quantenphysik“, das im selben Verlag erschienen ist. Grundlagen, die in diesem ersten Lehrbuch behandelt werden, werden gelegentlich zitiert und als bekannt vorausgesetzt.

Der Lehrstoff ist auf 21 Kapitel verteilt: Kapitel 1 beginnt mit historischen Bemerkungen zum Molekülbegriff sowie einer Darlegung der Ziele und Methoden des Buches. Kapitel 2 beschreibt die mechanischen Eigenschaften von Molekülen wie Größe, Form und Masse. Die dynamischen Größen Impuls und kinetische Energie werden in Bezug zu Druck und Wärmekapazität gesetzt. Das dritte Kapitel betrachtet Moleküle in elektrischen und magnetischen Feldern. Die Beziehungen zwischen der makroskopischen Polarisierung oder Permeabilität und den mikroskopischen Größen wie Dipolmoment und Polarisierbarkeit sowie deren Anisotropie werden ausführlich diskutiert. Elektrische Wechselfelder werden ebenfalls kurz betrachtet, um anhand des klassischen Modells eines gedämpften harmonischen Oszillators für ein Elektron Brechungsindex und Dispersion auf molekularer Ebene zu erklären.

Die Kapitel 4 bis 7 sind der Elektronenstruktur der Moleküle und dem Verständnis der chemischen Bindung gewidmet. Nach einer kurzen Erinnerung an die Grundaussagen der Quantenmechanik anhand des Wasserstoffatoms wird