

crystals“ (G. Gilli) und „Protein crystallography“ (G. Zanotti). Abgeschlossen wird das Buch mit einer Behandlung von „Physical properties of crystals“ durch M. Catti. Gerade die letzten vier Kapitel, bei denen auch Aspekte der Kristallstrukturlehre behandelt werden, die weit über das bloße Handwerkszeug des Strukturbestimmens hinausgehen, zeigen deutlich, daß die Autoren eingefahrene Wege bei der Darstellung der Materie erfreulicherweise verlassen haben. Daß sie dies außerdem in vorbildlicher Weise getan haben, zeichnet das Buch weiterhin aus, ebenso wie das überaus übersichtliche Layout im Stile der Lehrbücher von Atkins (viele schöne Abbildungen und Diagramme!). Hinzu kommt, daß in allen Kapiteln auch die Behandlung neuester Entwicklungen nicht vernachlässigt wurde, wobei, und auch das muß lobenswert hervorgehoben werden, stets ein ausgeprägter Bezug zur Praxis gewahrt bleibt. So ist das Buch auch für einen erfahrenen Praktiker der Methode eine ausgesprochen lehrreiche Lektüre, zumal die laufende Literatur umfangreich zitiert wird (ca. 850 Zitate!). Einige kleine Einwände: Das zweite Kapitel, „Crystallographic computing“, wirkt etwas deplaziert und wäre wohl besser im Zusammenhang mit „Solution and refinement of crystal structures“ abgehandelt worden, und die Behandlung der Molekülkristalle hätte sicherlich gewonnen, wenn auf die ohnehin sehr elementare Abhandlung der Bindungstheorie verzichtet und statt dessen z. B. der Molekülmechanik breiterer Raum eingeräumt worden wäre. Auch das Register hätte etwas umfangreicher ausfallen können.

Fazit: Ein sicherlich sehr empfehlenswertes Buch, wobei der erstaunlich günstige Preis die Freude noch weiter vergrößert. Aber ist es nur etwas für den Experten? Auch das erfreulicherweise nicht. Gerade durch die Behandlung der mehr chemischen und physikalischen Aspekte von Kristallen und Kristallstrukturen sollte es auch denjenigen, der nur an den Ergebnissen von Kristallstrukturbestimmungen interessiert ist, zu intensiver Lektüre anregen. Wenn dieser dann doch auch einmal einen Blick auf die Methode wirft, um so besser. Auf eines muß sich aber jeder Leser einstellen: Die Autoren machen wenig Konzessionen an diejenigen, die eine Darstellung ohne Mathematik bevorzugen würden.

Gerhard Müller
Fakultät für Chemie
der Universität Konstanz

Molecular Dynamics Simulation. Elementary Methods. Von J. M. Haile. Wiley, Chichester, 1992. XI, 489 S., geb. 47.50 £. – ISBN 0-471-81966-2

Dieses Buch hält, was es im Titel verspricht. Nach einem einführenden Kapitel über die Philosophie der Computersimulation macht es in Kapitel 2 mit der klassischen Dynamik und den Grundlagen der Computersimulation dynamischer Prozesse bekannt. Nächstes Thema ist die Simulation von Systemen aus harten Kugeln (Kapitel 3). Simulationsverfahren für Systeme mit kontinuierlichen Potentialfunktionen werden in den folgenden beiden Kapiteln behandelt: Finite-Differenzen-Methoden und die Simulation von Systemen aus weichen Kugeln. In den letzten beiden Kapiteln werden Methoden zur Bestimmung statischer bzw. dynamischer Eigenschaften eines simulierten Systems diskutiert. Dreizehn Anhänge bieten Material zur Vertiefung, Beispiele für Computerprogramme und andere nützliche Information. Eine Bibliographie gibt Hinweise auf Bücher und Übersichtsartikel zum Thema.

Das Buch ist eine nützliche Bereicherung der Literatur über die Computersimulation atomarer und molekularer Sy-

steme. Es erklärt sorgfältig und praktisch orientiert die Grundlagen moleküldynamischer Simulationen. Da jedes Kapitel eigene Literaturverweise enthält, findet der interessierte Leser leicht Zugang zu weiterführender Literatur. Jedes Kapitel bietet außerdem eine Reihe von Übungen, die weitere Einblicke ermöglichen. Das Buch liest sich leicht und veranschaulicht die Theorie mit graphischen Darstellungen und Ergebnissen von Simulationen, wo immer möglich. Darüber hinaus behandelt es Themen wie die Zuverlässigkeit von Trajektorien und Ergebnissen, Fehlerfortpflanzung, Gleichgewichtseinstellung und andere Probleme, die in anderen Beiträgen häufig zu kurz kommen.

Denjenigen, die ernsthaft an Computertechniken zur dynamischen Simulation interessiert sind, kann ich dieses gelungene und gut geschriebene Buch nur empfehlen.

Wilfred F. van Gunsteren
Laboratorium für Physikalische Chemie
der Eidgenössischen Technischen Hochschule
Zürich (Schweiz)

Synthetic Fluorine Chemistry. Herausgegeben von G. A. Olah, R. D. Chambers und G. K. Surya Prakash. Wiley, New York, 1992. XVII, 402 S., geb. 75.00 £. – ISBN 0-471-54370-5

Fluor zeigt als Element und in seinen Verbindungen Eigenschaften, die so stark von denen der anderen Halogene abweichen, daß sich eine Fluorchemie als eigener Zweig der Chemie mit speziellem methodischen Arsenal entwickelt hat. Dieser Zweig hat heute, 106 Jahre nach der erstmaligen Herstellung von elementarem Fluor, einen solchen Umfang erreicht, daß auch für den Fachmann ein Überblick kaum noch möglich ist. Das vorliegende Buch will auch keine systematische Übersicht geben, vielmehr stellen in 17 Kapiteln führende Wissenschaftler aus Universität und Industrie ausgewählte Gebiete der anorganischen und insbesondere der organischen Fluorchemie umfassend vor. Das Buch beruht auf Beiträgen des Symposiums „Synthetic Fluorine Chemistry“, das vom Loker Hydrocarbon Research Institute der University of Southern California im Februar 1990 organisiert worden war.

Schrobiglen (Kap. 1) beschreibt Herstellung und Lewis-Säure-Verhalten von Edelgasfluorid-Kationen. Christie, Wilson und Schack (Kap. 2) stellen Wege zum Ersatz von Fluor durch Sauerstoff in Fluoriden und Oxyfluoriden vor. Aubke, Cader und Mistry (Kap. 3) geben einen umfassenden Überblick über Übergangsmetallderivate starker Protonensäuren und Supersäuren. Seppelt (Kap. 4) beschreibt Herstellung und Eigenschaften von Verbindungen mit Fluor-stabilisierter Kohlenstoff-Schwefel-Mehrfachbindung. Lagow, Bierschenk, Juhlke und Kawa (Kap. 5) berichten über Perfluorpolyethersynthesen durch Direktfluorierung und potentielle Anwendungsgebiete für diese Verbindungen. Adcock (Kap. 6) beschreibt die Aerosol-Direktfluorierung als universelle Perfluorierungsmethode. Rozen (Kap. 7) stellt elektrophile Fluorierungen organischer Verbindungen mit Fluor und anderen Fluorierungsmitteln vor. Olah und Li (Kap. 8) zeigen den breiten Anwendungsbereich von Oniumpolyhydrogenfluorid-Fluorierungsmitteln. Burton (Kap. 9) beschreibt den Einsatz Perfluoralkyl-haltiger Organometallverbindungen in der fluororganischen Synthese. Prakash (Kap. 10) zeigt nucleophile Perfluoralkylierungen mit Perfluortrialkylsilanen. Farnham (Kap. 11) berichtet über siliciumorganische Reagentien als Synthone in der fluororganischen Chemie. Shteingarts (Kap. 12) beschreibt Syntheseaspekte elektrophiler ipso-Reaktionen von Polyfluorarenen. Takenaka und Lemal