

Experimente dieses Buches verlaufen mit den gewünschten kurzen Photolysezeiten, und fast keine der Vorschriften enthält spezielle Anmerkungen zur Arbeitssicherheit. In einigen Fällen scheinen die Versuchsvorschriften mit denen der Originalpublikationen identisch zu sein. Änderungen von Ansatzgröße und Vorgehensweise in Hinblick auf eine Durchführung im Praktikum dürften weder von den Autoren noch von den Herausgebern vorgenommen worden sein.

In der Einführung des Buches (10 Seiten) werden wichtige Voraussetzungen von photochemischen Reaktionen und Methoden zur Ermittlung der optimalen Reaktionsbedingungen beschrieben. Danach werden in einem kurzen Abschnitt die Gefahren beim Umgang mit photochemischer Ausrüstung behandelt. Zwar ist dieser Abschnitt sehr nützlich und interessant, doch wäre für einen Anfänger ein stark erweitertes Kapitel mit Abbildungen von photochemischen Apparaturen, Betriebsanleitungen und Sicherheitshinweisen von Vorteil. Würde zudem jedes Kapitel durch eine umfassendere Darstellung der Mechanismen und Anwendungen der vorgestellten Reaktionen eingeleitet, so wäre das Buch ein sehr viel wirkungsvolleres Lehrmittel.

Zusammenfassend ist zu sagen, daß Mattay und Griesbeck eine Sammlung von Vorschriften zahlreicher führender Wissenschaftler auf dem Gebiet der synthetischen Organischen Photochemie zusammengetragen haben, die eine wertvolle Quelle für Forscher der Organischen Chemie sein wird. Eine beachtliche, hervorragend gegliederte Fülle an Reaktionssequenzen berührt nahezu alle Aspekte des Gebiets. Allerdings setzt der Einsatz als Praktikumsbuch hohe Verantwortung und Vorausplanung sowohl auf Seiten des Praktikumsassistenten als auch des Studierenden voraus, um die akkurate und sichere Durchführung der Versuche im Rahmen eines Praktikums zu gewährleisten.

Scott Virgil

Massachusetts Institute of Technology
Cambridge, MA (USA)

Chemie der Atmosphäre. Von T. E. Graedel und P. J. Crutzen. Spektrum Akademischer Verlag, Heidelberg, 1994. 511 S., geb. 78.00 DM. – ISBN 3-86025-204-6

Das vorliegende Buch ist zur Unterstützung eines fächerübergreifenden Kurses „über das System Erde oder über Umweltchemie“ für Studierende im Grund-

studium gedacht. Für diesen Zweck eignet es sich gut. Auch Studienanfänger sollten mit den Kenntnissen der gymnasialen Oberstufe in der Lage sein, der Darstellung zu folgen.

Allerdings: der Titel des Buches ist mißverständlich. Das Buch besteht aus 19 Kapiteln, von denen sich zwar drei Viertel überwiegend mit der Atmosphäre beschäftigen (etwa ein Viertel behandelt überwiegend die Hydrosphäre, die Tektonik oder allgemeine klimatische Themen), davon jedoch nur wenige überwiegend mit chemischen Umsetzungen. Ein Kapitel trägt als Überschrift den Titel des ganzen Buches: „Die Chemie der Atmosphäre“. Dabei ist die Chemie auf den Kern derjenigen Reaktionen beschränkt, ohne die die Eigenschaften der Atmosphäre wie saure Niederschläge, Smogbildung, stratosphärisches „Ozonloch“ und das Klima überhaupt nicht zu verstehen wären. Interessante Details wie (als willkürlich herausgegriffene Beispiele) das Auftreten von Salpetriger Säure und Aceton, die Ozonolyse von Alkenen und die starken anthropogenen Emissionen von verzweigten Alkanen und aromatischen Kohlenwasserstoffen wird man dagegen vergeblich suchen.

Die Stoffauswahl wird durch die Überschriften der einzelnen Kapitel treffend wiedergegeben: 1. Einführung, 2. Die Erde und ihre treibenden Kräfte, 3. Der atmosphärische Strahlungshaushalt, 4. Die atmosphärische Zirkulation: Träger chemischer Bestandteile, 5. Aerosole und Hydrosole, 6. Der Wasserkreislauf und das Klima, 7. Chemische Grundlagen, 8. Die Chemie der Atmosphäre, 9. Die Chemie des Wassers, 10. Die Klimageschichte der Erde, 11. Die chemische Geschichte der Erde, 12. Globale Veränderungen: Die letzten Jahrhunderte, 13. Globale Veränderungen: Die letzten Jahrzehnte, 14. Haushalte und Kreisläufe, 15. Die Erstellung umweltchemischer Modelle, 16. Regionale Vorhersagen, 17. Globale Vorhersagen, 18. Das Klima der fernen Zukunft, 19. Wandel und Erhaltung des Bestehenden. Diese Kapitel werden ergänzt durch Erklärungen zu wichtigen Begriffen in alphabetischer Anordnung; zu jedem Kapitel gibt es Übungsaufgaben, deren Lösungen teilweise im Anhang angegeben werden. Das Buch enthält eine Fülle interessanter Abbildungen, die oft aus Originalarbeiten geophysikalischer Zeitschriften stammen. Die Zahl der Druckfehler ist durchschnittlich; der Text fällt aber durch eigenwillige Wortschöpfungen auf (z.B. atomisch, Kollisionsrate, Teilreservoirhaushaltserstellung, Antwortzeit, atmosphärische Chemieforschung, entblößte Wasserstoffatome).

Wer sich besonders durch den Untertitel des Buches, „Bedeutung für Klima und Umwelt“, angesprochen fühlt, erhält von ausgewiesenen Experten auf dem Gebiet der „Erdwissenschaften“ einen repräsentativen Überblick zum Thema und kann das Gefühl haben, daß kein wirklich wichtiger Themenbereich ausgelassen worden ist. Ebenso vermittelt dieses Buch denjenigen, die sich speziell mit der Chemie der Erdatmosphäre beschäftigen, all das, was man aus den anderen Wissenschaftsbereichen, die sich mit der Atmosphäre beschäftigen, auch einmal gehört haben sollte. Für alle diese Interessenten, aber auch für die Bibliotheken chemischer, besonders physikalisch-chemischer Institute, ist dieses Buch sehr zu empfehlen – nicht zuletzt wegen des günstigen Preises. Über eher chemische Fragen, etwa zu den Abbaumechanismen organischer Verbindungen mit mehr als einem Kohlenstoffatom, wird man allerdings auf einschlägige Monographien wie die von Warneck oder von Pitts/Finlayson-Pitts zurückgreifen.

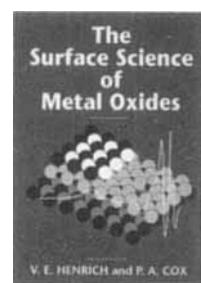
Friedhelm Zabel

Fachbereich 9

der Universität-Gesamthochschule
Wuppertal

The Surface Science of Metal Oxides. Von V. E. Henrich und P. A. Cox. Cambridge University Press, Cambridge, 1994. 464 S., geb. 55.00 £ – ISBN 0-521-44389-X

Das Wissenschaftsgebiet „Surface Science“ verbindet die Disziplinen Oberflächenphysik und Oberflächenchemie. In diesem interdisziplinären Gebiet ist die Physik bei weitem gereifter als die Chemie. Dies liegt vor allem an der Einkristallphysik von Metallocerflächen und den Fortschritten bei der Untersuchung von Halbleitern. Auf der Seite der Chemie gibt es allgemein nur relativ wenig untersuchte Reaktionen und nur sehr begrenzt Untersuchungen an wohldefinierten (im Buch als gleichbedeutend mit einkristallin aufgefaßten) Oberflächen chemischer Verbindungen. Dies gilt besonders für die große Klasse der festen Oxide. Diese haben eine enorme wissenschaftliche und technische Bedeutung, die die der Elementmetallocerflächen bei weitem übersteigt. Dennoch führte dies bis heute nur zu einem geringen Fortschritt



wenig untersuchte Reaktionen und nur sehr begrenzt Untersuchungen an wohldefinierten (im Buch als gleichbedeutend mit einkristallin aufgefaßten) Oberflächen chemischer Verbindungen. Dies gilt besonders für die große Klasse der festen Oxide. Diese haben eine enorme wissenschaftliche und technische Bedeutung, die die der Elementmetallocerflächen bei weitem übersteigt. Dennoch führte dies bis heute nur zu einem geringen Fortschritt

auf diesem Gebiet. Die Ursachen dafür sind in der Einleitung des vorliegenden Buches sehr gut allgemein erläutert und werden immer wieder durch die vielen vorgestellten Beispiele verdeutlicht.

Das Werk ist eine kritische Zusammenfassung der wesentlichen Ergebnisse zur Oberflächenphysik und -chemie von einkristallinen Oxiden. Behandelt werden viele Beispiele mit Hauptgruppenoxiden von Magnesium, Aluminium, Zink und Zinn (Siliciumoxid wird als Nichtmetalloxid ausgeschlossen) und Nebengruppenoxiden von Titan, Vanadium und Eisen. Weitere Oxide wurden berücksichtigt, soweit sich genügend Literaturbeispiele finden ließen. Bedauerlicherweise werden die Alkalimetallocide, die sich thematisch sehr gut in den Rahmen des Buches einfügen würden, wohl wegen des Mangels an Beispielen mit „Einkristallen“ nicht erwähnt. Ebenso werden dünne Schichten von Metallociden mit einkristallinen Oberflächen nicht behandelt, obwohl es sich hierbei um ein gerade sehr im Aufschwung befindliches Arbeitsgebiet handelt.

Die behandelten Oxide werden dafür um so gründlicher vorgestellt. Nach einer kurzen Einführung in die Idealstrukturen werden die elektronischen Eigenschaften der Haupt- und Nebengruppenmetallocide ausführlich auf hohem Niveau behandelt. Vorangestellt ist ein Kapitel über die zugehörigen Gitterschwingungen, die die physikalischen Eigenschaften der Oberflächen wesentlich beeinflussen. Im Anschluß folgen zwei große Kapitel über die Oberflächenchemie von Molekülverbindungen und deren Grenzflächenreaktionen mit anderen Oxiden und Metallen. Die hier angesiedelte Behandlung der Themen Heterogene Katalyse und Keramische Supraleiter ist allerdings eher als Streifschuß denn als Volltreffer aufzufassen.

Besonders auffallend an diesem Werk ist, daß chemische und physikalische Aspekte gleichermaßen kompetent und gründlich behandelt werden. Der Leser muß daher über Vorkenntnisse in beiden Disziplinen verfügen; es handelt sich um kein einführendes Werk. Ein Charakteristikum interdisziplinärer Forschung, die unterschiedliche Verwendung gleicher Therminologie, wird mehrfach herausgearbeitet und jeweils erklärt. Ein besonders gelungenes Beispiel sind die Definitionen des Begriffs Hybridisierung auf S. 104.

Von kaum zu überschätzendem Wert ist die erschöpfende Auswertung der einschlägigen Literatur, die teilweise in außerordentlich informativen Tabellen zusammengefaßt ist. Dadurch wird das Buch zu einem Nachschlagewerk des auf

diesem Gebiet tätigen Forschers. Hier geht das Buch weit über den Rahmen einer Monographie hinaus und wird zum Standardwerk.

Diesen Anspruch erfüllen auch die ausführlich bebilderten Beispiele, die in wichtigen Fällen, wie der Oberflächenchemie von Titandioxid (Kap. 6.4) so ausführlich sind, daß man in der Primärliteratur kaum weitere Aspekte finden wird. Die knapp 1000 Literaturstellen, ein gut gegliedertes Inhaltsverzeichnis sowie Schlagwort- und Verbindungsindizes erhöhen den Gebrauchswert als Referenzquelle zusätzlich.

Nachteilig ist die nicht immer konsequente Verweisdichte: Oft sucht man längere Zeit nach dem Zitat zu einem beschriebenen Sachverhalt. Nicht ganz zutreffend ist ferner die Angabe, daß dieses Buch das erste seiner Art sei. Zwar werden zwei weitere Werke in der Einleitung behandelt, doch andere einschlägige Monographien wie die von Nowotny und Dufour werden im Text nicht erwähnt.

Insgesamt handelt es sich um ein außerordentlich nützliches Werk, das ein Wissensgebiet kompetent und zuverlässig zusammenfaßt. Es kann als Standardwerk empfohlen werden und wird jedem auf dem Gebiet Tätigen ein zuverlässiger Ratgeber sein. Die allgemeinen Aussagen des Buches sind durchaus anregend beim Entwurf eigener Forschungsprojekte auf dem Gebiet der „Surface Science“, das gegenwärtig erheblich an Aktualität gewinnt. Der Stil der Darstellung, die instruktiven Abbildungen und nicht zuletzt die hervorragende Verarbeitung machen das Buch auch zu einem Lesebuch für den auf Nachbargebieten, wie Festkörperphysik, Oxidchemie, Materialforschung oder Katalyse, tätigen Forscher. Bibliotheken seien wärmstens als zusammenfassende und langlebige Monographie empfohlen.

Robert Schlögl

Fritz-Haber-Institut
der Max-Planck-Gesellschaft,
Berlin

A New Dimension to Quantum Chemistry. Analytic Derivative Methods in Ab Initio Molecular Electronic Structure Theory. Von Y. Yamaguchi, Y. Osamura, J. D. Goddard und H. F. Schaefer. Oxford University Press, Oxford, 1994. 471 S., geb. 60.00 £. – ISBN 0-19-507028-3

Es ist wohl keine Übertreibung, wenn im Titel des vorliegenden Buches die Entwicklung der analytischen Ableitungen für ab-initio-Wellenfunktionen als eine

neue Dimension in der Quantenchemie bezeichnet wird. Seit den bahnbrechenden Arbeiten von P. Pulay Ende der sechziger Jahre hat vor allem die Möglichkeit mit analytischen Gradienten, Gleichgewichtsstrukturen und Sattelpunkte zuverlässig zu bestimmen, den Stellenwert quantenchemischer ab-initio-Rechnungen deutlich erhöht. Aber auch die Berechnung von harmonischen Schwingungsfrequenzen, anharmonischen Korrekturen, IR- und Raman-Intensitäten und vielem mehr ist erst durch die Entwicklung und effiziente Implementierung von Algorithmen zur analytischen Berechnung von Ableitungen des Energieausdrucks möglich geworden. Eine Reihe von Übersichtsartikeln und Aufsatzsammlungen sind zu diesem Thema bereits erschienen; die mit Abstand ausführlichste Darstellung haben jedoch Schaefer et al. mit dem vorliegenden Werk vorgelegt. Auf über 450 Seiten werden, ausgehend von einer knappen Einführung in den LCAO-MO-Formalismus, die expliziten Ausdrücke für die ersten und zweiten Ableitungen für unterschiedliche Hartree-Fock(HF)-SCF-Wellenfunktionen sowie für Wellenfunktionen aus Konfigurationswechselwirkung (CI), Zwei-Konfigurations-SCF und allgemeinem Multikonfigurations-SCF(MCSCF) hergeleitet. Die anschließenden Kapitel beschreiben im Detail die Lösung der „Coupled Perturbed“-HF-, CI- oder MCSCF-Gleichungen. Daran schließt sich eine Diskussion höherer Ableitungen sowie der Spezialfall der Ableitungen nach einem elektrischen Feld an. Ein kurzes Kapitel über die erst kürzlich von Handy und Schaefer entwickelte „Z-Vektor“-Methode zur Berechnung analytischer Ableitungen beschließt den mathematischen Teil des Buches. Im vorletzten Kapitel beschreiben die Autoren einige typische Anwendungen von analytischen Ableitungen zur Beantwortung chemischer Fragestellungen, bevor sie schließlich im letzten, dem 20. Kapitel, einen optimistischen Ausblick auf zukünftige Entwicklungen geben. Es folgen 28 Appendices, in denen die Kerngleichungen aus allen Kapiteln zusammengefaßt werden. Den Schlußpunkt des Buches markiert eine Zusammenstellung der relevanten Originalliteratur, die in erfreulicher Aktualität bis in das Jahr 1993 reicht.

Das Buch ist von ansprechender formaler Aufmachung, wie man es von den anderen Bänden dieser Reihe gewöhnt ist. Bereits bei einem ersten Überfliegen fällt jedoch der selbst für eine theoretisch ausgerichtete Monographie ungewöhnlich hohe Anteil an mathematischen Ausdrücken auf. Strenggenommen ist das Werk