

geschrieben, geht aber aufgrund seiner Thematik die Wissenschaftler weltweit an. Es ist nicht nur unabdingbar für wissenschaftliche Neulinge, sondern darüber hinaus extrem lehrreich für alle Wissenschaftler auf allen Stufen der Karriereleiter. Wie im Vorwort betont, „haben besonders die erfahrenen Wissenschaftler eine große Verantwortung für die Wahrung eines Verhaltenskodex auf höchstmöglichem Niveau, als Vorbilder für Studenten und junge Wissenschaftler zu fungieren, geeignete Ausbildungsprogramme zu entwerfen und auf Vorwürfe im Zusammenhang mit Verstößen gegen ethische Normen richtig zu reagieren. Selbst erfahrene, ältere Wissenschaftler können die Wichtigkeit ethischer Fragestellungen neu erfahren, indem sie mit ihren Studenten das diskutieren, was bisher stillschweigend akzeptiert wurde“. Angesichts der augenblicklichen anti-wissenschaftlichen Einstellung einer Bürgerschaft, die in zunehmendem Maße dazu aufgefordert ist, zu Themen mit beträchtlichem wissenschaftlichen oder technischen Gehalt Stellung zu nehmen, könnte auch die allgemeine Öffentlichkeit von der klaren Erläuterung vom Wesen der Wissenschaft als Prozeß sowie als Ergebnis profitieren, aber auch von der Kenntnis der Grenzen der Wissenschaft und des immer nur Vorläufigen ihrer Errungenschaften.

Bisher hat unser Department die besten Chemiestudenten für ihre Leistungen mit einem Jahresabonnement einer wissenschaftlichen Zeitschrift belohnt. Dieses Büchlein wird ein gleich-, wenn nicht gar höherwertiges Geschenk abgeben.

George B. Kauffman
Department of Chemistry
California State University
Fresno, CA (USA)

Symmetry and Structure (Readable Group Theory for Chemists). 2. Auflage. Von *F. A. Kettle*. John Wiley & Sons, Chichester, 1995. 416 S., Broschur 18.99 £ – ISBN 0-471-95476-4.

Das Buch wendet sich vorzugsweise an Studierende der Chemie. Der Titel ist etwas irreführend, da nicht die Symmetrie von Kristallstrukturen behandelt wird. Es handelt sich vielmehr um einen einführenden Text, der den Zusammenhang zwischen der geometrischen und elektronischen Struktur der Moleküle und ihrer Symmetrie behandelt. Dabei dient die chemische Bindung als Beispiel, um auf

unkonventionelle und recht anschauliche Weise in die Gruppentheorie einzuführen. Das Buch gliedert sich in 13 Kapitel und in einen Anhang (1–6). Die 2. Auflage ist im Vergleich zur ersten nur geringfügig verändert; es wurde jedoch je ein Kapitel über Raumgruppen und eines über spektroskopische Untersuchungen von Kristallen hinzugefügt.

Im ersten Kapitel (9 Seiten) werden verschiedene Modelle für die Bindungen in einem Ammoniakmolekül vorgestellt. Am Beispiel des H_2O -Moleküls werden im zweiten Kapitel (25 Seiten) Punktgruppen, Gruppentafeln, Charakterentafeln und irreduzible Darstellungen sehr anschaulich und elementar eingeführt. Im dritten Kapitel (28 Seiten) werden dann die Orthonormalitätseigenschaften von irreduziblen Darstellungen, die Zerlegung von reduzierbaren Darstellungen in ihre irreduziblen Komponenten, Transformationseigenschaften von Atomorbitalen, symmetrieangepaßte Kombinationen von Orbitalen, Wechselwirkungen zwischen Bindungen und Orbital-Energieniveaus am Beispiel der elektronischen Struktur von Wasser und der Punktgruppe C_{2v} beschrieben. Die Punktgruppe D_{2h} wird im vierten Kapitel (34 Seiten) als direktes Produkt ihrer Normalteiler C_2 und C_i vorgestellt. Anschließend werden die Symmetrie der Atomorbitale von C_2H_6 bzw. B_2H_6 , deren Bindungen, sowie die Projektionsoperatoren-Methode diskutiert. Am Beispiel von BrF_3 mit der Symmetrie C_{4v} wird im fünften Kapitel (26 Seiten) für eine etwas kompliziertere Gruppe gezeigt, wie man mit Hilfe der Orthonormalitätsbeziehungen eine Charakterentafel systematisch und vollständig ableiten kann. Das sechste Kapitel behandelt erneut Symmetrie und Bindungen im Ammoniak (12 Seiten). Mit der Symmetrie kubischer Moleküle (Beispiel SF_6) und mit oktaedrischen Übergangsmetallkomplexen beschäftigt sich das siebente Kapitel (42 Seiten). Die Punktgruppen O , O_h und T_d und ihre Charakterentafeln werden vorgestellt. Etwas allgemeineren Charakter hat das achte Kapitel (11 Seiten), das sich mit Gruppe–Untergruppe-Beziehungen befaßt und den Zusammenhang zwischen den irreduziblen Darstellungen einer Gruppe und denen ihrer Untergruppen zeigt. Im neunten Kapitel (14 Seiten) wird die Beziehung zwischen der Symmetrie eines Moleküls und seinem Schwingungsspektrum hergestellt und Normalschwingungsmoden werden eingeführt. Das wichtige zehnte Kapitel (22 Seiten) beschäftigt sich mit direkten Produkten irreduzierbarer Darstellungen und Produkten von Wellenfunktionen, mit der Symmetrie unterschiedlicher Elektronen-

konfigurationen und mit spektroskopischen Auswahlregeln. Am relativ einfachen Beispiel der π -Orbitale des Cyclobutadiens mit der Symmetrie C_4 werden im elften Kapitel (18 Seiten) komplexe Charaktere vorgestellt, und das Auftreten von optischer Aktivität wird diskutiert. Im zwölften Kapitel (46 Seiten) erfolgt dann der Übergang von den Punktgruppen zu den Raumgruppen. Nacheinander werden vorgestellt: die Kristallsysteme, die Bravaisgitter, die kristallographischen Punktgruppen, symmorphe und asymmorphe Raumgruppen, Hermann-Mauguin-Symbole und Elementarzellen. Das letzte Kapitel (15 Seiten) beschäftigt sich mit spektroskopischen Untersuchungen von Kristallen. Es wird gezeigt, daß wegen der Translationsinvarianz der meisten Phänomene, auf denen die spektroskopischen Messungen beruhen, die Diskussion im allgemeinen auf die Faktorgruppen der Raumgruppen nach ihren Translationenormalteilern, d.h. auf Punktgruppen, beschränkt werden kann.

Anhang eins und zwei geben auf zusammen 42 Seiten eine kurze, mathematische Einführung in die Gruppentheorie und in die Matrizendarstellungen von Gruppen. Anhang drei enthält die Charakterentafeln der „wichtigeren“ Punktgruppen, das sind I_h und I , O_h , O , T_d , T_h und T , D_{nh} , D_{nd} , D_n , C_{nv} und C_n (jeweils mit $2 \leq n \leq 6$), C_{2h} , C_{3h} , C_i , S_4 , C_s und C_1 . In Anhang vier werden auf 15 Seiten die Gruppenorbitale mit π -Symmetrie für Fluor in SF_6 abgeleitet. Die Punktgruppen $C_{\infty v}$ und $C_{\infty h}$ werden auf 5 Seiten im Anhang fünf behandelt. Die Schoenflies- und die Hermann-Mauguin-Symbole für Punktgruppen sind in zwei Tabellen in Anhang sechs einander gegenübergestellt.

In seiner anschaulichen und unkonventionellen Art der Darstellung ist das Buch gut zu lesen und im wesentlichen leicht verständlich. Die Anzahl der Druckfehler ist nicht übermäßig hoch. Beides trifft aber leider nicht auf die beiden letzten Kapitel zu, welche dieser Ausgabe neu hinzugefügt wurden, und insbesondere nicht auf den Anhang sechs. Hier ist die Zahl der Fehler deutlich höher und die Darstellung alles andere als klar. Die Hermann-Mauguin-Symbole sind häufig so verstümmelt, daß man Mühe hat, die Gruppen zu identifizieren. Diese Kapitel können niemandem als Einführung in die Raumgruppen empfohlen werden. Sie sollten entweder ganz fortgelassen oder so bald wie möglich sehr gründlich überarbeitet werden.

Elke Koch
Institut für Mineralogie,
Petrologie und Kristallographie
der Universität Marburg