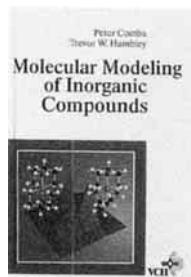


Molecular Modeling of Inorganic Compounds. Von P. Comba und T. W. Hambley. VCH Verlagsgesellschaft, Weinheim, 1995. 197 S., geb. DM 188.00. – ISBN 3-527-29076-1

Wenn sich an der Zahl der Lehrbücher eines Fachgebiets dessen Bedeutung ermessen läßt, so wird der Bedeutung des Molecular Modeling im anorganisch-chemischen Bereich mit dem Werk von Comba und Hambley sicher eine glänzende Grundlage geschaffen. Es ist ein solides, ausführliches und gut lesbares Werk über die auf empirischen Rechnungen basierenden Annäherungen an Strukturen und Energien anorganischer Systeme. Obwohl der Titel des Buches eigentlich Molekülmechanik anorganischer Verbindungen lauten müßte, da weder semi-empirische noch ab-initio-Methoden zur Berechnung elektronischer Strukturen eingeschlossen sind.

Der Text ist im wesentlichen in drei Abschnitte untergliedert. Nach einer allgemeinen Einführung wird in Teil I (Kapitel 1-5) die mathematische Grundlage der Molekülmechanik (MM) gelegt. Teil II (Kapitel 6-14) befaßt sich mit den verschiedenen Anwendungen, und in Teil III (Kapitel 15-17) werden viele nützliche Hinweise und Richtlinien gegeben, die bei Berechnungen und der Interpretation der Ergebnisse wichtig sind. Die für jeden Teil unabhängig aufgeführten Literaturverweise sind umfassend, obwohl wegen der Gliederung des Buches Wiederholungen nicht vermieden werden konnten und die Zitate 288 und 289 von Teil II fehlen.



Das Thema wird in Teil I zügig entwickelt, wobei auf eine ansprechende Darstellung mit übersichtlicher Gliederung Wert gelegt wurde – eine absolute Notwendigkeit bei einem Buch, das keine Vorkenntnisse voraussetzt. Am hervorstechendsten ist die in den späteren Kapiteln häufig wiederholte Feststellung, daß einzelne Kraftfeldparameter nichts mit ihren spektroskopisch bestimmten Gegenstücken zu tun haben müssen. Sie sind vielmehr im Verbund zu verstehen und können nur in Bezug auf ihr Leistungsvermögen, globale Eigenschaften wie Molekülstrukturen zu reproduzieren, bewertet werden. Die individuelle „ideale“ Bindungslänge, der „ideale“ Bindungswinkel und die Kraftkonstanten etwa haben für sich genommen keine Bedeutung.

Die Stärke des Buches zeigt sich besonders in Teil II, in dem eine erstaunliche Vielfalt von Anwendungen beschrieben wird. Dabei spannt sich der Bogen von der Visualisierung von Molekülstrukturen bis zur Vorhersage von Enantioselektivitäten, von Racematspaltungen und stereoselektiven Synthesen zur Metallionen-Selektivität und von der Kombination von MM-Rechnungen mit spektroskopischen Ergebnissen zum Verständnis von Elektronenübertragungsreaktionen. Des Weiteren werden der Jahn-Teller-Effekt, die bioanorganische Chemie sowie die Organometallchemie und Verbindungen mit Elementen des s-, p-, und f-Blocks behandelt.

Natürlich konzentrieren sich die Anwendungsbeispiele auf die Interessensgebiete der Autoren, was hauptsächlich für die Chemie der Übergangsmetalle gilt, trotzdem wird diese bemerkenswert breit und abwechslungsreich geschildert, was Zeugnis über die Pionierrolle ablegt, die die Autoren auf diesem Gebiet innehaben. Anhand der ausgewählten Beispiele aus

der Organometall- und der Hauptgruppenchemie sowie der der f-Elemente bekommt der Leser ein gutes Gefühl für die Verbindungen und die Eigenschaften, die berechnet werden können.

In vielerlei Hinsicht entsteht Teil III ganz selbstverständlich aus den Teilen I und II, trotzdem erklären die Autoren einige der Fallen ausführlich, in die man beim Versuch MM auf anorganische Moleküle anzuwenden, tappen kann, besonders wenn es sich um übergangsmetallhaltige Verbindungen handelt. Obwohl man annehmen darf, daß das Programm MO-MEC der Autoren hilfreich zur Lösung praktischer Probleme beitragen kann, vermeiden es die Autoren, dieses in den Vordergrund zu stellen.

Die wichtigste Botschaft ist klar, und sie wird ausdrücklich optimistisch vorge tragen. MM kann sogar in der vielfältigen anorganischen Chemie eingesetzt werden, vorausgesetzt, man erkennt deren interpolierenden Charakter und nimmt diese Einschränkung hin. Dies kann restriktiv sein und ebenso bedeuten, daß der Anwender ein eigenes Kraftfeld entwickeln muß, wenn für das ihn interessierende System keines zur Verfügung steht. Auch wenn dies Zaghafte abschrecken kann, geben die Autoren doch eine zwingende Begründung für den Erfolg des MM, und es ist ermutigend zu sehen, was damit alles möglich ist.

Alles in allem wird das Buch sowohl den aktiven Forscher als auch den interessierten Laien ansprechen, und es ist Pflichtlektüre für all jene, die die theoretischen Annäherungen an anorganische Systeme mitverfolgen wollen.

Robert J. Deeth
Inorganic Computational Chemistry
Group, Department of Chemistry
University of Warwick (Großbritannien)