

meintlich und auch wirklich gefährlichen Stoffen aufwächst, undenkbar geworden.

Zu einem der großen Erlebnisse Oliers wird seine persönliche Entdeckung des Periodischen Systems im Jahre 1945 im Science Museum in Kensington – er ist überwältigt von der Klarheit und der Ordnung der Mendelejew'schen Tabelle und ihrer Prognosekraft. Wieviel Verlässlichkeit diese Spalten und Zeilen ausstrahlen, was für ein Gegensatz zum Chaos der menschlichen Beziehungen! Spätestens hier drängt sich der Vergleich zum *Periodischen System* von Primo Levi auf, einem Buch, das auch Sacks einmal erwähnt und das eher durch seine menschliche Wärme und Zuwendung begeistert als Sacks metallisch-harte Schilderung.

Das Buch bezieht seinen Reiz zum einen aus der Schilderung der Chemie (der Metalle) aus der Sicht eines jungen Menschen – jedenfalls gelingt es dem Erzähltalent Sacks, die Faszination der frühen Jahre wieder zu erwecken – und zum anderen aus dem Wissen des heute fast 70-Jährigen. Dieses Wissen vermittelt er häufig in umfangreichen Fußnoten, die auch einem in der Geschichte der Chemie Bewanderten immer wieder interessante Neuigkeiten bieten und um so erstaunlicher sind, als sie von jemand stammen, der die Chemie nicht zu seinem Beruf gemacht hat. Tatsächlich entfernt sich Sacks in der zweiten Hälfte des Buchs immer mehr von der Nachzeichnung seines Lebenswegs und bietet eine facetten- und lehrreiche Schilderung der Geschichte der Chemie und der Naturwissenschaften, wobei so unterschiedliche Phänomene wie Lumineszenz und Radioaktivität, um nur zwei von mehreren zu nennen, gründlich erörtert werden.

Warum haben die so überaus erfolgversprechenden Voraussetzungen nicht zu einem berühmten Chemiker Oliver Sacks geführt? Dieser Frage, die sich dem Leser mit dem Fortschritt seiner Lektüre in zunehmendem Maße aufdrängt, geht der Autor im Schlusskapitel „Das Ende einer Liebe“ nach. Offenbar waren mehrere Gründe dafür verantwortlich, letztendlich die Medizin als Studienfach zu wählen: der Druck der Eltern, neue, andere Interessen – statt Davy und Lavoisier wird Flaubert gelesen (leider sagt Sacks nicht, was) – und

die Erkenntnis, dass auch die Chemie kein Gebiet ist, das letzte Antworten zu geben imstande ist. Eine (romantische) Liebe war an ihr Ende gelangt, aber doch nicht so weit gestorben, dass man sich an sie nicht Jahrzehnte später mit Freude erinnerte. Diese ursprüngliche Faszination auch Fremden verständlich und nachvollziehbar gemacht zu haben, ist das Verdienst dieses Buches.

Henning Hopf

Institut für Organische Chemie
der Technischen Universität
Braunschweig

Fundamentals of Quantum Chemistry. Von Michael Mueller. Kluwer Academic/Plenum Publishers, New York 2001. 265 S., geb. 69.50 \$.— ISBN 0-306-46596-5

Begünstigt durch die Vielzahl von kommerziell erhältlichen quantenchemischen Programmen gehören Elektronenstrukturrechnungen längst zum täglichen Brot von Experimentatoren in der Chemie und in verwandten Naturwissenschaften. Die weitgehende Standardisierung vieler Rechenverfahren – man denke nur an die Einführung wohldefinierter Basissätze wie 6-31G, 6-31G+ usw. – ermöglicht es dem Nichtexperten oft diese Methoden nach dem Black-Box-Prinzip zu nutzen. Selbstverständlich birgt solch eine Vorgehensweise Gefahren, wenn der Benutzer nicht über fundierte Kenntnisse bezüglich der Vorteile und Grenzen der einzelnen Methoden verfügt. Das Vermitteln der entsprechenden theoretischen Grundlagen sowie das Sammeln von ersten praktischen Erfahrungen ist daher heute fester Bestandteil des Chemiestudiums.

In diesem Kontext richtet sich das vorliegende Lehrbuch vor allem an Studierende in den ersten Semestern mit nur minimalen mathematischen und chemischen Vorkenntnissen. Diesen soll dem Autor zufolge eine möglichst prä-

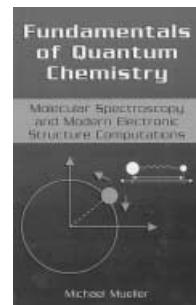
xisnahe Einführung in die Quantenchemie geboten werden. Wie aus dem Untertitel des Buchs, „Molecular Spectroscopy and Modern Electronic Structure Computations“, hervorgeht, sind neben den Elektronenstrukturmethoden die Interpretation und die Vorhersage von Rotations- und Vibrationspektren unter Zuhilfenahme der Quantenmechanik ein weiteres Schwerpunktthema.

Im ersten Kapitel werden äußerst knapp die Newtonschen und die Hamiltonschen Bewegungsgleichungen der klassischen Mechanik vorgestellt und auf den harmonischen Oszillator angewandt. Kapitel 2 führt in die grundlegenden Konzepte der Quantenmechanik ein und greift auf das übliche eindimensionale und dreidimensionale Teilchen-im-Kasten-Modell zurück, das in Kapitel 3 auf das Teilchen-auf-dem-Ring-Modell und das Teilchen-auf-der-Kugel-Modell ausgedehnt wird.

Den besonderen Wert dieses Buches machen nicht nur die zahlreichen eingestreuten Rechenbeispiele, sondern auch die mit „Chemical Connection“ und „Point of Further Understanding“ überschriebenen Kästen aus, in denen der Leser auf den praktischen Nutzen des soeben Gelernten in der Chemie hingewiesen bzw. zum tieferen Nachdenken oder Diskutieren angeregt wird. So knüpft der Autor beispielsweise schon beim harmonischen Oszillator die Verbindung zur Vibrationspektroskopie.

Eine zentrale Rolle kommt Kapitel 4 zu, in dem das Variationsprinzip und die Störungsrechnung behandelt werden. Von beiden Näherungsmethoden wird im weiteren Verlauf des Buches noch mehrmals Gebrauch gemacht. Mit der Behandlung des quantenmechanischen harmonischen Oszillators in Kapitel 5 wird der Leser unter anderem auf die zwei nachfolgenden Kapitel über Vibrations- und Rotationsspektroskopie zweiatomiger und mehratomiger Moleküle vorbereitet. Es entsteht der Eindruck, als habe Michael Mueller besonders an dieser Stelle seiner fachlichen Kompetenz Ausdruck verliehen, indem er auf eine Reihe von unterschiedlichen Näherungsordnungen eingeht und immer wieder auf das Zusammenspiel von Theorie und Experiment verweist.

Die letzten beiden Kapitel sind der Elektronenstruktur von Atomen (Kapi-



tel 8) und Molekülen (Kapitel 9) gewidmet. Zunächst werden die Lösungen der Schrödinger-Gleichung für das 1-Elektron-Atom erarbeitet, die dann als Ausgangspunkt für die Lösungen des Heliumatoms mittels der Näherungsverfahren aus Kapitel 4 dienen. Im Abschnitt zu den Mehrelektronenatomen wird im Anschluss an die Slater-Regeln erstmals das Konzept von Hartree-Fock-Rechnungen qualitativ erläutert. Auf die LCAO-Näherung wird im Rahmen der Behandlung des Wasserstoffmoleküls kurz eingegangen, bevor elementare Grundlagen der Molekularmechanik angesprochen werden. Daraufhin wird die Hartree-Fock-Theorie etwas vertieft und die Problematik der Basissätze angerissen. Korrelierte Methoden werden, abgesehen von einem kurzen Abstecher in die Møller-Plesset-Störungstheorie, nur vage angedeutet. Einer kurzen Auflistung von semiempirischen Methoden folgt eine eher oberflächliche Einführung in die Dichtefunktionaltheorie. Sehr hilfreich sind die zahlreichen Tabellen im letzten Kapitel, die die Qualität der mit verschiedenen Elektronenstrukturmethoden berechneten Bindungslängen und Dissoziationsenergien veranschaulichen. Ansonsten handelt es sich meiner Meinung nach um das schwächste Kapitel des gesamten Buches, nicht zuletzt deshalb, weil sowohl der Titel als auch der Untertitel dieses Lehrbuchs eine wesentlich detailliertere Abhandlung erwarten lassen. Darüber hinaus sind im Text zahlreiche sachlich falsche Formulierungen, insbesondere im Abschnitt über die Dichtefunktionaltheorie, zu finden.

Abschließend bleibt festzuhalten, dass sich das vorliegende Buch prinzipiell als Grundlage für eine einführende Vorlesung in die Quantenmechanik für Chemiestudierende vor dem Vordiplom bietet. Positiv sind die motivierenden Hinweise auf die Zusammenhänge zwischen theoretischen Grundlagen und praktischen chemischen Anwendungen. Für besonders gelungen halte ich in diesem Zusammenhang die Kapitel über Vibrations- und Rotationsspektroskopie. Die Aufgaben am Ende eines jeden Kapitels eignen sich hervorragend für ergänzende studentische Gruppenübungen. Weiterführende Literaturangaben fehlen leider in allen Kapiteln außer in Kapitel 6. Zu bemängeln ist außerdem

die oftmals beschämende Qualität vieler Abbildungen (einige Kurven sind wohl mit der Hand gezeichnet!) sowie die große Anzahl von Fehlern, bei denen es sich nicht immer um Druck- oder Tippfehler handeln kann. Auffallend ist beispielsweise die wiederholte Verwendung des Wortes „affect“ anstelle des im Kontext zu erwartenden „effect“. Schwerwiegendster Kritikpunkt ist, dass dieses Buch, entgegen dem erklärten Ziel des Autors, den Leser nicht zur kompetenten Benutzung eines quantenchemischen Programm Pakets befähigt. In dieser Kategorie gibt es weitaus bessere Lehrbücher, z.B. *Introduction to Computational Chemistry* von Frank Jensen.

Nikos L. Doltsinis

Lehrstuhl für Theoretische Chemie
der Universität Bochum

The Biological Chemistry of the Elements. Herausgegeben von J. J. R. Frausto da Silva und R. J. P. Williams. Oxford University Press, Oxford 2001. 575 S., Broschur 39.95 £.—ISBN 0-19-850848-4

Die vorliegende zweite Auflage des 1991 erschienenen Lehrbuchs wurde deutlich überarbeitet. Die damalige Ausgabe wurde von vielen Studierenden und Forschern als Lehrbuch in der Bioanorganischen Chemie verwendet. Die neue Ausgabe ist sogar noch besser als jene, sowohl hinsichtlich Aufbau und Gliederung als auch in Bezug auf den Inhalt. Durch das ausführlichere Sachwortverzeichnis wird der Lehrbuch- und Nachschlagewerkcharakter noch mehr hervorgehoben. Kein anderes auf dem Markt befindliches Buch bietet eine aktuellere und umfangreichere Behandlung des Themas Bioanorganische Chemie wie das vorliegende.

Die Autoren haben die Gliederung des Stoffs in zwei Teile aus der Erstauflage beibehalten: In sechs Kapiteln werden die physikalischen und chemischen Grundlagen vermittelt, die den Wirkungen der Elemente in lebenden Systemen zugrunde liegen. In 12 weiteren Kapiteln wird auf spezielle Gruppen von Elementen näher eingegangen. Außerdem beschäftigen sich zwei Kapitel (Kapitel 7 und 20) mit den Wechselwir-

kungen und der Signalverarbeitung innerhalb der Zelle, der Zellen untereinander sowie der Zellen und ihrer Umgebung. Diese Kapitel sind einzigartig und in keinem anderen Lehrbuch der Bioanorganischen Chemie zu finden. Kapitel 7 bietet eine holistische Beschreibung der Vorgänge in einer Zelle, einschließlich ihrer Lokalisation und Auseinanderabstimmung. In Kapitel 20 wird diese Darstellung der Zellvorgänge vor allem durch das Konzept eines zellulären „Metalloms“ (frei und chelatisiert), das durch Austausch mit der Umgebung in Kontakt steht, erweitert. Die Autoren erläutern, wie das „Metallom“ zusammen mit dem Genom und Proteom ein interaktives System erzeugt, das um das Überleben kämpfen kann: Die Anfänge der Evolution werden hier vermutet.

Dieses Buch ist nicht in dem traditionellen Stil verfasst, dass Strukturen oder physikalische Eigenschaften isolierter Moleküle unter biologischen Aspekten beschrieben werden. Der Schwerpunkt liegt vielmehr auf einer didaktisch gelungenen Erklärung der Funktionsweise der Elemente in lebenden Organismen. So werden in den Ausführungen der ersten sieben Kapiteln lebende Systeme als Netzwerk betrachtet, in dem Stoffe, Energie und Informationen innerhalb einer strukturierten Zelle und zwischen der Zelle und ihrer Umgebung fließen. Die Überarbeitung der Kapitel 9–19 äußert sich vor allem in der Aufnahme von Abschnitten über die Vernetzung der Wechselwirkungen der Elemente und die genetische Kontrolle der Zellmoleküle, deren Aufgabe die Aufnahme und Verteilung der Elemente ist.

Die bedeutenden Fortschritte, die auf dem Gebiet der Strukturbestimmung der „Moleküle des Lebens“ gemacht wurden, werden leider nicht in der Weise behandelt wie der übrige Stoff. Aber den Lesern, die sich für diesen Bereich der Bioanorganischen Chemie interessieren, bieten sich mehrere Möglichkeiten an, sich darüber zu informieren: z.B. die 2001 erschienenen Bücher über Metalloproteine von Huber et al. und Bertini et al. und Datenbanken wie die Braunschweiger Enzym-Datenbank (BRENDA), die Protein-Datenbank (PDB), die „Prosthetic groups and Metal Ion SitEs in proteins“-Datenbank (PROMISE), die Metalloprotein-Datenbank (Scripps)