

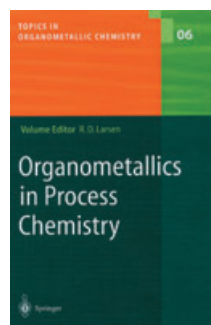
rasche Entwicklung immer genauerer und effizienterer Methoden wird im vorliegenden Buch umrissen, ebenso wie einige der hierfür wichtigen Grundlagen. Die Berechnung der verschiedensten NMR- und EPR-Eigenschaften wird im Rahmen der unterschiedlichsten Näherungen diskutiert: von semiempirischen Ansätzen, über Hartree-Fock- und Dichtefunktional-Methoden, bis hin zu hochgenauen Coupled-Cluster- oder auch Multireferenz-Ansätzen. Dabei wird die für die Quantenchemie so wichtige Hierarchie von Ab-initio-Methoden deutlich, die für die systematische Untersuchung der Genauigkeit genäherter Lösungen der Schrödinger-Gleichung unerlässlich ist. Zwar sind die genauesten Verfahren wegen des hohen Rechenaufwandes bislang auf kleinere Molekülsysteme beschränkt, die Hierarchie ist jedoch auch für die „Kalibrierung“ der zum Teil sehr populären Dichtefunktional-Methoden von entscheidender Bedeutung, da für diese bislang keine systematische Annäherung der exakten Lösung möglich ist. Darüber hinaus gibt das Buch einen Einblick in die Behandlung relativistischer Effekte bei der Berechnung magnetischer Eigenschaften sowie in die Berücksichtigung von Einflüssen der Moleküldynamik und des Lösungsmittels. Die meisten Beiträge des Buches befassen sich mit der Methodik der Berechnung magnetischer Eigenschaften. Zehn Artikel schildern einige Beispielanwendungen, können aber selbstverständlich nicht als erschöpfender Überblick über die Literatur verstanden werden, sondern eher als eine kleine Motivation für weitere spannende Forschung.

Quantenchemische Berechnungsmethoden sind zwar weit verbreitet und etabliert – auch durch die kommerziell verfügbaren Programmpakete –, jedoch ist die Quantenchemie ein sehr dynamisches und verhältnismäßig junges Gebiet. Entsprechend ist auch in Zukunft eine Vielzahl methodischer Neuerungen zu erwarten, die in Kombination mit immer schnelleren Computern ein faszinierendes Zusammenspiel von Theorie und Experiment ermöglichen werden. NMR- und EPR-Daten wird hierbei zweifellos eine bedeutende Rolle zukommen. Wer sich über Kürzel wie GIAO, IGLO, LORG, ARCS oder NICS informieren möchte, dem bietet

das Buch einen beachtlichen Einblick in die Entwicklungen bei der Berechnung von NMR- und EPR-Spektren und eine Vielzahl von Ausgangspunkten für weitere Stöbern in der Originalliteratur.

Christian Ochsenfeld
Theoretische Chemie
Universität Tübingen

Organometallics in Process Chemistry



Band 6 der Reihe Topics in Organometallic Chemistry. Herausgegeben von Robert D. Larsen. Springer Verlag, Heidelberg 2004. 295 S., geb., 213,95 €.—ISBN 3-540-01603-1

Aus den Forschungslabors pharmazeutischer Unternehmen sind metallorganische Synthesen heute nicht mehr wegzudenken. Insbesondere die vergangenen Jahre haben eine sprunghafte Entwicklung hin zu einer kaum mehr überschaubaren Zahl an Anwendungen metallorganischer Reagentien gesehen, und die Vergabe des Nobelpreises an Knowles, Noyori und Sharpless 2001 unterstreicht nachdrücklich die immense Bedeutung metallorganischer Transformationen in der modernen organischen Synthesechemie. Die Entwicklung hat zudem längst Einzug in die Präparation von Pharmaka im technischen Maßstab gehalten, was einen Überblick über dieses sich rasant entwickelnde Gebiet dringend erforderlich machte. Hier setzt vorliegendes Buch an.

Die einzelnen Kapitel, von führenden Industriechemikern kompetent verfasst, geben jeweils den aktuellen Entwicklungsstand wieder. Der Fokus liegt entweder auf einem bestimmten Metall (Li, Ti, Rh, Ru, Pd) oder Liganden für hochselektive technische Prozesse oder auf der Erzeugung spezieller Zielstrukturen durch metallhaltige Reagentien. Abgerundet wird das Buch mit einem

Kapitel über die Entfernung von Metallen nach abgeschlossener Reaktion aus einem technischen Prozess.

Bei nur 295 Seiten mit zehn in ihrer Bedeutung gut zusammengestellten Einzelaufsätzen sollte jeder Interessierte schnell und zuverlässig finden können, was er sucht. Das Buch eignet sich als Nachschlagewerk und kann neue Ideen anregen. Es liefert dem Industriechemiker rasch mögliche Lösungsansätze für ein bestimmtes Syntheseproblem und dem akademischen Forscher Daten über die geschichtliche Entwicklung einzelner Reaktionen sowie das ein oder andere aktuelle Anwendungsbeispiel für die Lehre. Die Aufgliederung der Inhaltsverzeichnisse in eine kurze Übersicht zu Beginn des Buchs und zusätzliche Untergliederungen am Anfang jedes Kapitels erleichtert die Suche nach der gewünschten Information. Dies kommt einer Verwendung als schnelles Nachschlagewerk entgegen.

Das Buch ist hinsichtlich der Auswahl der Beispiele klar für eine industrielle Klientel ausgelegt und reicht naturgemäß als Highlight-Sammlung in seiner Breite nicht an Lehrstandards wie das allseits bekannte „Schlosser-Manual“ heran (siehe Rezension in *Angew. Chem.* **2003**, 115, 504). Dennoch wird in den einzelnen Kapiteln vornehmlich auf wissenschaftliche Originalliteratur und auf spezielle Monographien verwiesen (bis 2001, z. T. auch 2002). Die für die industrielle Anwendung wohl ebenso wichtige Patentliteratur steht demgegenüber zurück, an dieser Stelle besteht Verbesserungsbedarf.

Organometallics in Process Chemistry ermöglicht ohne Anspruch auf Vollständigkeit, einen schnellen und gezielten Einstieg in pharmazeutisch-industriell wichtige metallorganische Reaktionen. Damit gehört es in jedem Fall in einschlägige Firmenbibliotheken. Darüber hinaus kann es auch Hochschullehrern wertvolle Informationen liefern, sodass es – insbesondere als Teil der Reihe „Topics in Organometallic Chemistry“ – auch in den Universitäten nicht fehlen sollte.

Martin Bröring
Fachbereich Chemie
Universität Marburg

DOI: 10.1002/ange.200485232