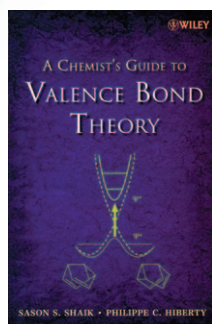




A Chemist's Guide to Valence Bond Theory



Von Sason S. Shaik und Philippe C. Hiberty. John Wiley & Sons, Hoboken 2007. 316 S., geb., 82.00 €,—ISBN 978-0-03735-5

Die vorliegende Monographie über eine der wesentlichen Theorien der chemischen Bindung, die Valenzbindungstheorie (VB-Theorie), stammt aus der Feder zweier anerkannter Experten, die sie durch einprägsame und überzeugende Originalarbeiten jahrzehntelang präsent gehalten haben. Das Buch legt in überzeugender Weise die Tragfähigkeit der VB-Theorie bei der Analyse chemischer Reaktivität und ungewöhnlicher Bindungsverhältnisse dar. Betont wird auch, dass die sachgerechte Verwendung der VB-Theorie eine wohlüberlegte Herangehensweise und Grundkenntnis erfordert. So wurde die VB-Methode vor allem durch unsaubere Anwendungen in der Vergangenheit in Misskredit gebracht, was die Autoren mit entsprechenden Fallstudien klar dar- bzw. widerlegen. Der Abriss führt den Leser von den Grundlagen des namen-

gebenden quantenmechanischen Ansatzes (Kapitel 2–4) über einfache, qualitative „Papier-und-Bleistift“-Modelle (Kapitel 6–8) zu den heute verfügbaren computergestützten Rechenverfahren (Kapitel 2, 9, 10). Durch die Aufnahme von Übungsaufgaben inklusive Lösungen wird das Buch dem eingangs formulierten Anspruch, ein Lehrbuch für den unerfahrenen Leser zu sein, das qualitative Einblicke in die behandelte Quantenmethode gewährt, in hervorragender Weise gerecht.

Dem historischen Teil folgt in den Kapiteln 2 und 3 die Einführung grundlegender Begrifflichkeiten und mathematischer Terme; Kapitel 4 stellt die gegenseitigen Transformationen zwischen den Ausdrücken der MO- (Molekülorbital-) und VB-Theorien prinzipiell dar, während Kapitel 5 auf die Auswirkungen des Vereinfachungsgrades eines gewählten VB-Ansatzes auf die Behandlung spezieller Fragestellungen eingeht. Zurecht wird die Äquivalenz der MO- und VB-Ansätze in ihren exakten Formulierungen hervorgehoben, und etwaige Divergenzen werden auf die unvermeidliche Einführung von Vereinfachungen zurückgeführt. Die Gleichwertigkeit der MO- und VB-Theorien und die manchmal unsachgemäße Verwendung der letztgenannten – ausgelegt als ihr Versagen – mag zwar überbetont erscheinen, doch lernt der Leser dank zutreffender Wahl und ausführlicher Besprechung der Beispiele (u. a. durch die Beschreibung des Grundzustandes des Sauerstoffmoleküls) Feinheiten, die beim Lösen ähnlicher Problemstellungen entscheidend sein können. Bildlicher gestaltet sich die Behandlung chemischer Konzepte mithilfe von Korrelationsdiagrammen (Kapitel 6). Anschaulich und akribisch analysierte Beispiele umfassen Betrachtungen zu Reaktivität und Struktur in den Reaktionen zwischen Elektrophilen und Nucleophilen, bei Protontransferprozessen, bei radikalischen sowie pericyclischen Reaktionen.

Überlegungen zur Symmetrie von Benzol animieren zum Nachdenken über die Gültigkeit allgemein anerkannter Erklärungsmuster. Eine Fortsetzung finden Symmetriebetrachtungen in der Beschreibung angeregter Zustände einfacher Kohlenwasserstoffe im anschließenden 7. Kapitel. Didaktisch herausragend sind vor allem die Kapitel 8 und 9, obwohl auch hier trotz der durchgehend eingängigen Sprache die mancherorts lockere Begriffsverwendung für den „VB-Neuling“ verwirrend sein könnte. Kapitel 8 beleuchtet detailliert und beachtenswert kritisch vereinfachende Annahmen und Grenzen der Anwendbarkeit der in der organischen Chemie oft eingesetzten Spinpaarungsschemata. Systematisch und auf leicht verständliche Weise, auch für einen Leser ohne Vorkenntnisse in modernen Realisierungen theoretischer Modelle, werden in Kapitel 9 die Unterschiede zwischen den einzelnen Methoden der VB-Familie sowie ihre Implementierungen vorgestellt.

Das Buch illustriert das Potenzial der VB-Theorie bei konzeptionellen Verständnisfragen, geht aber zugleich auf etwaige Fallstricke unbedachter Anwendung vereinfachter VB-Methoden ein. Es bietet eine vielseitige Vorlage und erschöpfende Literaturzusammenstellung für die Vorbereitung einer Veranstaltung über diese Methode. Zwar setzt eine Abhandlung der VB-Theorie unumgänglich allgemeines Grundlagenwissen in theoretischer Chemie voraus, doch gelingt es den Autoren auf qualitativer Ebene, einen Ein- und Überblick über den Ansatz und seine Anwendungsmöglichkeiten zu verschaffen. Als solches sollte es in keiner Bibliothek fehlen.

Adelina Nemirowski, Peter R. Schreiner
Institut für Organische Chemie
Justus-Liebig-Universität Gießen

DOI: 10.1002/ange.200785589