



### Computational Spectroscopy

Quantenchemische Rechnungen fallen, je nach ihrer Zielsetzung, wohl in zwei Klassen: Die eine Seite bilden die Entwicklung einer Theorie und deren Überprüfung an einfachen Molekülen, die sie gut beschreiben sollte. Auf der anderen Seite stehen Forscher, die sich bei der Interpretation gewonnener Daten auf Computer und Programme stützen, um die Eigenschaften von Molekülen besser zu verstehen. Beide Gebiete sind zwar nicht durch eine klare Grenze voneinander getrennt, dennoch ist es von Vorteil, sie zusammenzubringen – wie geschehen in dem Buch *Computational Spectroscopy*, das Ende des Jahres 2010 erschienen ist.

Wie der Herausgeber gleich zu Anfang betont, gibt es noch einen weiteren Grund, das Buch zu lesen: die rasante Entwicklung auf beiden Gebieten – Theorie und Experiment. Die Schrödinger-Gleichung datiert aus dem Jahr 1926, doch erst in den 1970ern verfügte man über Computer, die für Chemiker nützliche Rechnungen ausführen konnten. Und es dauerte bis in die 1990er, bis die Ergebnisse solcher Rechnungen endlich mit experimentellen Daten übereinzustimmen begannen. Entsprechende Verfahren sind alles andere als einfach, und viele aus spektroskopischer Sicht interessante Moleküleigenschaften lassen sich bisher nur schwer durch Computercodes erfassen oder zuverlässig berechnen. Trotzdem werden computerchemische Verfahren bereits in gewaltigem Maßstab angewendet; wir sind nicht nur in der Lage zu berechnen, wie die Orbitale und energetischen Zustände eines Moleküls aussehen, sondern wir können uns auch ein Bild von seiner Farbe, seinen magnetischen Eigenschaften oder seinen Reaktionen mit einem Lösungsmittel machen.

Meiner Ansicht nach haben theoretische Rechnungen auch zu Fortschritten bei spektroskopischen Experimenten geführt. Einige neue Techniken (auch kommerzialisierte) stützen sich zu einem gewissen Ausmaß auf eine rechnerische Aufbereitung der Messdaten mithilfe von Computern, z.B. in der schwingungsspektroskopischen Bestimmung optischer Aktivität. Auf anderen Gebieten wie der NMR-Spektroskopie sind quantenchemische Rechnungen nicht zwingend notwendig, doch auch NMR-Fachleute haben erkannt, dass eine parallele theoretische Modellierung der beobachteten chemischen Verschiebungen und Kopplungskonstanten hilfreich bei der Interpretation der Spektren und der Bestimmung von Molekülstrukturen sein kann.

Das Buch umfasst 13 Kapitel von anerkannten Spezialisten und deckt die am häufigsten genutzten spektroskopischen Methoden ab, wenn auch, wohl

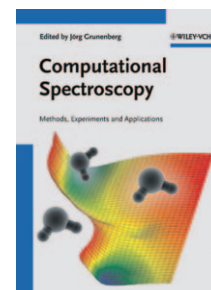
aus Platzgründen, auf manche Techniken und Prozeduren nicht eingegangen werden konnte. Allerdings erscheinen einige Aspekte des Themas, selbst für Nichtspezialisten, nicht in ausreichender Tiefe behandelt. Durch den enzyklopädischen Aufbau des Buchs ist es für Neulinge nicht einfach, ausgehend von den grundlegenden Prinzipien der Quantenmechanik (die im ersten Kapitel dargelegt werden) glatt in die Beschreibung der spezifischen Anwendungen einzusteigen.

Trotzdem präsentiert das Buch einen ausgewogenen Überblick zur modernen theoretischen Spektroskopie. Es hat mir gut gefallen, dass J. F. Ogilvie im ersten Kapitel die Quantenchemie nicht als etwas einführt, das „vom Himmel gefallen“ ist, sondern auch die Grenzen des Konzepts diskutiert und offene Fragen anspricht. Dadurch wissen auch nicht vorgebildete Leser, dass die Zahlen, die der Computer als Ergebnisse auswirft, immer im Licht der gemachten Vereinfachungen und Näherungen zu sehen und folglich nicht frei von Fehlern sind.

Im zweiten Kapitel stellen I. Alkorta und J. Elguero eine praktische Vorgehensweise bei der Berechnung von NMR-spektroskopischen Parametern für organische Verbindungen vor, die sie mit einem Überblick zur Literatur der Jahre 2004–2009 abrunden. Der allgemeine Trend, Umgebungs- oder Lösungsmittelleffekte bei Rechnungen zu berücksichtigen, wird hier schon deutlich, mehr noch aber in dem darauf folgenden, theoretisch ausgerichteten Kapitel über EPR-Spektroskopie von P. Cimino, F. Neese und V. Barone.

Im Kapitel über UV/Vis-Spektroskopie führt B. Mennucci geschickt in die bestehenden theoretischen Methoden ein. H. Rhee, S. Yang und M. Cho beschreiben den Schwingungs-Circulardichroismus mit Schwerpunkt auf zeitabhängigen Experimenten, die bislang noch sehr selten sind. Das Kapitel von L. Di Bari und G. Pescitelli über den elektronischen Circulardichroismus folgt einem eher klassischen Ansatz; es geht mehr um die Erklärung spektroskopischer Aspekte einschließlich einer vereinfachten Methode zur Simulierung von Spektren. Die komplizierteste Modellierung wird wohl in der Impedanzspektroskopie benötigt, die das Kapitel von C. Schröder und O. Steinhauser zum Thema hat. Ich war überrascht zu erfahren, wie verbreitet diese Technik schon in Strukturstudien an Biomolekülen angewendet wird.

Über die erwähnten Kapitel hinaus verdienen auch einige spezialisiertere Beiträge eine Erwähnung. So stellen E. Kraka, J. A. Larsson und D. Cremer ihr Konzept der adiabatischen Schwingungsmoden vor. Um Schwingungen geht es auch bei L. Andrews: Er zeigt, wie präzise Berechnungen dabei helfen können, durch Laserablation freigesetzte Moleküle zu identifizieren. Eindrucksvoll sind auch die komplizierten Rechnungen zum Dipolmoment von Molekülen, die F. M.



**Computational Spectroscopy**  
Methods, Experiments and Applications. Herausgegeben von Jörg Grunenberg. Wiley-VCH, Weinheim 2010. 416 S., geb., 149.00 €, ISBN 978-3527326495

Fernandez und J. Echave darlegen. P. Schwerdtfeger berichtet über die Suche nach Paritätsverletzungen in Molekülen – ein Phänomen, dessen Nachweis noch immer schwierig ist. J. D. Kubicki und K. T. Mueller geben außerdem einen Überblick zu den interessanten Anwendungen von Rechenverfahren in der Umweltchemie, wofür die Theorie allerdings merklich vereinfacht wird.

Das abschließende Kapitel von T. W. Schmidt entlässt den Leser mit einer Beschreibung der Geschichte der Spektroskopie und ihrer Verquickung mit der Astronomie. Insgesamt handelt es

sich bei *Computational Spectroscopy* nicht um ein Lehrbuch, sondern um eine wichtige Zusammenstellung für Forscher auf diesem Gebiet, die viele angenehme Überraschungen bereit hält. Ich bin froh, ein Exemplar zu besitzen.

Petr Bouř

Institut für Organische Chemie und Biochemie  
Akademie der Wissenschaften der Tschechischen Republik, Prag (Tschechische Republik)

DOI: 10.1002/ange.201101367

# Neugierig?



**Sachbücher**  
von  
**WILEY-VCH**

[www.wiley-vch.de/sachbuch](http://www.wiley-vch.de/sachbuch)