



### Discovering Chemistry with Natural Bond Orbitals

Das vielleicht wichtigste Konzept in der Chemie ist das der chemischen Bindung. Über Jahre hinweg haben viele Wissenschaftler zum Verständnis der chemischen Bindung beigetragen und verschiedene Modelle entwickelt. Aufgrund immer fortschrittlicherer computergestützter Rechnungen dürfte man erwarten, dass diese Theorien auf eine sichere Basis gestellt werden. Doch eigentlich erhält man durch moderne Berechnungen der Elektronenstruktur kein Bindungsmuster, sondern nur eine Energie (und eine elektronische Wellenfunktion) einer bestimmten Konfiguration der Kerne des untersuchten Systems. Einige behaupten sogar, dass die chemische Bindung ein unklar definiertes theoretisches Konzept sei, dessen Zeit abgelaufen ist. Diese Behauptung ist sicher nicht vollkommen absurd: Einige Probleme in der Chemie können auf der Grundlage von Potentialflächen erörtert werden, ohne dass man sich darüber Gedanken machen muss, ob ein Atompaar nun „bindend“ ist – was auch immer dies ausdrücken soll – oder nicht. Dieser Ansatz kann erstaunlich befreiend sein.

Für die meisten Chemiker waren und sind Bindungsmodelle jedoch unentbehrlich. Durch Analysen der Energie oder der Wellenfunktion können theoretische Einblicke in die Bindung erhalten werden, die mithilfe von traditionellen oder neuen Bindungsmodellen interpretiert werden. Eine der bekanntesten Methoden ist der von Foster und Weinhold 1980 eingeführte Ansatz der Natürlichen Bindungorbitale („Natural Bond Orbital“, NBO),<sup>[1]</sup> der später weiterentwickelt und erweitert wurde. *Discovering Chemistry with Natural Bond Orbitals* ist das zweite Buch in dem Professor Weinhold, zusammen mit Clark Landis, die NBO-Methode beschreibt und ihr Potential aufzeigt. Sein erstes Buch, *Valency and Bonding*,<sup>[2]</sup> ist eine umfassende Abhandlung über die Theorie und Anwendungen. Das vorliegende Buch ist ein nutzerfreundliches Handbuch, in dem didaktisch geschickt gezeigt wird, wie die NBO-Methode und entsprechende Computerprogramme am vorteilhaftesten angewendet werden.

Wahrscheinlich haben fast alle Wissenschaftler, die Elektronenstrukturrechnungen durchgeführt haben, die NBO-Methode bereits angewendet oder aber in Publikationen kennengelernt. Eines der verlässlichsten und bekanntesten Verfahren, um Atompartialladungen zu berechnen, die Natürliche Populationsanalyse, beruht auf dem NBO-Ansatz. Allerdings wird das Potenzial des NBO-Ansatzes, vermutlich aus Unkenntnis der Möglichkeiten,

überhaupt nicht ausgeschöpft. Ein Leitfaden für die Praxis, wie ihn das vorliegende Buch bietet, wird also vielen, die sich mit theoretischer Chemie beschäftigen, sehr willkommen sein. Die Theorie der NBO-Methode wird in dem Buch nur insoweit erläutert, dass der Leser eine ungefähre Vorstellung davon hat. Der Schwerpunkt liegt eindeutig auf praktischen Anwendungen. Berechnungen vieler Systeme werden detailliert beschrieben, und die Ergebnisse werden sorgfältig analysiert und interpretiert. Elementare und anspruchsvolle Themen halten sich die Waage: Die Autoren behandeln die Grundlagen der NBOs und Atomladungen, Drei-Zentren-zwei-Elektronen-Bindungen, Übergangsmetalle, Lewis-Resonanzstrukturen, sterische Effekte, NMR- und ESR-Spektroskopie, intermolekulare Wechselwirkungen, Reaktivität und angeregte Zustände. Auch die Durchführung von NBO-Rechnungen wird diskutiert. Beispielsweise werden verschiedene Versionen der NBO-Methode sowie deren Kombinationen mit einigen Elektronenstrukturcodes vorgestellt. Jedes Kapitel enthält zahlreiche Übungen und Aufgaben aus der Praxis.

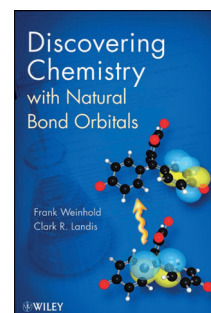
Ob Anfänger oder Experte – wer sich allgemein für das Thema chemische Bindung interessiert und die verschiedenen Analysen und Beispiele in dem Buch gründlich studiert, wird aus dieser Lektüre großen Nutzen ziehen. Ich tat es jedenfalls. Auf diesem Gebiet der theoretischen Chemie wird manchmal sehr leidenschaftlich argumentiert: Die eigene Methode wird in den höchsten Tönen gelobt, die der anderen wird abqualifiziert. Eine solch extreme Parteilichkeit ist in dem Buch nicht zu erkennen, sodass auch die, die nicht vorhaben, die NBO-Methode anzuwenden, eine Menge lernen können. Dennoch werden in erster Linie sowohl unerfahrene als auch erfahrene Wissenschaftler, die ihre Kenntnisse in der NBO-Analyse erweitern wollen, zu den Lesern dieses Buchs zählen. Diese Zielgruppe findet bereits im Internet viele Informationen.<sup>[3]</sup> Das vorliegende Buch bietet allerdings noch mehr Informationen, und viele Interessierte ziehen eine systematisch aufgebaute Dokumentation mit vielen Erläuterungen vor, wie sie das Buch bietet.

Jeremy Harvey

University of Bristol (Großbritannien)

DOI: 10.1002/ange.201208492

- [1] J. P. Foster, F. Weinhold, *J. Am. Chem. Soc.* **1980**, *102*, 7211–7218.
- [2] F. Weinhold, C. Landis, *Valency and Bonding: A Natural Bond Orbital Donor-Acceptor Perspective*, Cambridge University Press, **2005**.
- [3] Unter <http://www.chem.wisc.edu/~nbo5/index.htm>.



**Discovering Chemistry with Natural Bond Orbitals**  
Von Frank Weinhold und Clark E. Landis. John Wiley & Sons, Hoboken, 2012.  
336 S., Broschur, 69,90 €.—  
ISBN 978-1118119969