

Ionen ist aufgrund des großen Cu-Cu-Abstandes (Cu-Cu 388 pm, Cu(Metall) 256 pm) sehr unwahrscheinlich. Sie könnte vielmehr über die Stapel der π -Elektronensysteme erfolgen. Den Kupfer-Ionen kommt offenbar die Funktion einer Leitungsbrücke zwischen den einzelnen Stapeln zu: Die Tatsache, daß sich kein ESR-Signal registrieren läßt (sehr starke Verbreiterung), und die hohe Leitfähigkeit bei fehlendem Phasenübergang deuten auf einen mehrdimensionalen Leiter^[14].

Eingegangen am 5. Mai,
ergänzte Fassung am 6. Juni 1986 [Z 1757]

- [1] Einkristall-Leitfähigkeiten: Tetrathiafulvalen (TTF)/TCNQ: $\sigma(66\text{ K}) = 14700 \text{ S cm}^{-1}$ (J. Ferraris, D. O. Cowan, V. Walatka, J. H. Perstein, *J. Am. Chem. Soc.* 95 (1973) 948); Tetramethyltetrateselenaufvalen (TMTSF)/2,5-DM-TCNQ: $\sigma(10\text{ K}; 13\text{kbar}) = 10^5 \text{ S cm}^{-1}$ (A. Andrieux, P. M. Chaikin, C. Duroure, D. Jerome, C. Weyl, K. Bechgaard, J. R. Andersen, *J. Phys. (Les Ulis, Fr.)* 40 (1979) 1199).
- [2] F. Iwasaki, *Acta Crystallogr. B* 27 (1971) 1360; I. Silverman, N. F. Yannoni, *J. Chem. Soc. B* 1967, 194; B. Rosenau, C. Krieger, H. A. Staab, *Tetrahedron Lett.* 26 (1985) 2081.
- [3] Beste Synthese von TCNQ: R. J. Crawford, *J. Org. Chem.* 48 (1983) 1366. Substituierte TCNQs: R. C. Wheland, E. L. Martin, *ibid.* 40 (1975) 3101.
- [4] A. Aumüller, S. Hünig, *Angew. Chem.* 96 (1984) 437; *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* 23 (1984) 447; *Liebigs Ann. Chem.* 1986, 142, 165.
- [5] S. Hünig, A. Aumüller, U. Schubert, *Liebigs Ann. Chem.* 1985, 1216.
- [6] A. Aumüller, E. Hädicke, S. Hünig, A. Schätzle, J. U. von Schütz, *Angew. Chem.* 96 (1984) 439; *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.* 23 (1984) 449.
- [7] Arbeitsvorschrift: Man vereinigt siedende Lösungen von 184 mg (1.00 mmol) 2,5-DM-DCNQ in 20 mL CH₃CN und 128 mg (672 mmol) CuI in 10 mL CH₃CN, läßt erkalten und saugt den ausgefallenen schwarzen Niederschlag ab. Ausbeute: 188 mg (87%) (2,5-DM-DCNQ)₂Cu; Fp = 229°C (Zers.); korrekte C, H, N-Analyse.
- [8] Arbeitsvorschrift: Eine Lösung von 46 mg (250 μmol) 2,5-DM-DCNQ und 223 mg (1.00 mmol) CuBr₂ in 60 mL CH₃CN wird bei 20°C mit einer Stromdichte von 53 $\mu\text{A cm}^{-2}$ 72 h in einer Zelle mit Diaphragma und Pt-Elektroden elektrolysiert. An der Kathode scheiden sich 17 mg (30%) bis zu 6 cm lange, schwarze Nadeln von (2,5-DM-DCNQ)₂Cu ab. Fp = 229°C (Zers.); passende C, H, N-Analyse.
- [9] Vierpunkt-Leitfähigkeitsmessungen mit aufgedampften Goldstreifen senkrecht zur Kristall-Längsachse. Messungen der Anisotropie der Leitfähigkeit mit verkleinerten Kontaktdimensionen sind im Gange.
- [10] R. E. Peierls: *Quantum Theory of Solids*, Oxford University Press, London 1955, S. 108.
- [11] H. H. Afify, F. M. Abdel-Kerim, H. F. Aly, A. A. Shabaka, *Z. Naturforsch.* A 33 (1978) 344.
- [12] F. Csöregi, P. Kierkegaard, R. Norrestan, *Acta Crystallogr.* 31 (1975) 314.
- [13] Weitere Einzelheiten zur Kristallstrukturuntersuchung können beim Fachinformationszentrum Energie, Physik, Mathematik GmbH, D-7514 Eggenstein-Leopoldshafen 2, unter Angabe der Hinterlegungsnummer CSD-51963, der Autoren und des Zeitschriftenzitates angefordert werden.
- [14] J. U. von Schütz, H. P. Werner, H. C. Wolf, A. Aumüller, P. Erk, S. Hünig, *Proc. Colloq. AMPERE* 23 (1986), im Druck.

NEUE BÜCHER

Vom Würfelspiel zum Naturgesetz. Simulation und Modelldenken in der Physikalischen Chemie. Von G. Harsch. VCH Verlagsgesellschaft, Weinheim 1985. X, 269 S., geb. DM 58.00. – ISBN 3-527-26226-1

Es hat bisher nicht an Versuchen gefehlt, die nicht leichte Materie der Physikalischen Chemie einfach und didaktisch geschickt darzustellen. Trotzdem gelingt es dem Autor, einen neuen Weg zu gehen, welcher dem mathematisch nicht versierten Leser besonders entgegenkommt. Er stellt eine Sammlung von Brett- und Würfelspielen vor und illustriert damit einige fundamentale Konzepte der statistischen Thermodynamik und der Reaktionskinetik.

Einzelne Kapitel behandeln Modellspiele für die Maxwell'sche Geschwindigkeitsverteilung, die Boltzmann-Verteilung, den Entropiebegriff und für chemische Reaktionen. Im Schlußkapitel sind Spiele zu einer Reihe von Problemen, unter anderem aus der Theorie der Chromatographie, der Lichtabsorption, der Kristallisation und der Entmischung von Flüssigkeiten, zusammengestellt.

Die vorliegende Sammlung ist gut gelungen und spiegelt die langjährige Erfahrung des Autors im Hochschulunterricht wider. Vorausgesetzt ist kaum mehr als eine Kenntnis der elementaren mathematischen Begriffe und Operationen. Schwierige Konzepte wie der Entropiebegriff werden vom Leser „spielerisch“ erfahren. Historische Einzelheiten zur Entwicklung der statistischen Thermodynamik bereichern das Buch entscheidend. Im Abschnitt über chemische Reaktionskinetik nimmt der Autor auch Beispiele aus jüngster Zeit über oszillierende Reaktionen und molekulare Selektionsprozesse auf. In dieses Kapitel hätte auch der von Gillespie entwickelte Algorithmus zur Simulation chemischer Prozesse hineingepaßt, vor allem da er gut geeignet ist, den Übergang zwischen den extrem kleinen Teilchenzahlen der Spiele und den Gesetzmäßigkeiten der Ki-

netik in Realsystemen zu illustrieren. Ein Abschnitt „Spiele auf dem Taschenrechner“ ist für den Leser sicherlich sehr nützlich. Schade, daß nicht auch die heutzutage fast überall zugänglichen Mikrocomputer mit einbezogen wurden. Auf ihnen läßt sich vieles im Studentenbetrieb rasch und didaktisch erfolgreich demonstrieren.

Alles in allem ist die vorliegende ausgezeichnete Monographie eine Bereicherung der Literatur für den physikalisch-chemischen Unterricht. Sie kann Lehrenden und Lernenden wärmstens empfohlen werden. Auch der ausgebildete Physiker oder Chemiker wird vieles Interessante in diesem Buch entdecken: alte, längst geläufige Sachverhalte stellen sich, durch die „Spielbrille“ gesehen, von einer neuen Seite dar.

Peter Schuster [NB 736]
Institut für Theoretische Chemie
und Strahlenchemie der Universität Wien

Structure and Spectra of Molecules. Von W. G. Richards und P. R. Scott. John Wiley, Chichester 1985. IX, 172 S., Paperback £ 6.95. – ISBN 0-471-90579-0

In dieser knappen Einführung geht es den Autoren vorwiegend darum, die physikalischen Zusammenhänge spektroskopischer Größen mit der elektronischen und geometrischen Struktur eines Moleküls zu erläutern. Die zugrunde gelegten Modelle werden definiert, Energiewerte und Quantenzahlen werden angegeben, die Eigenfunktionen werden qualitativ beschrieben. Im Gegensatz zu manchen „praktischen“ Anleitungen zur instrumentellen Analytik enthält dieses Buch zwar viele schematische, aber nur wenige einfache, reale Spektren, und kaum empirische „Regeln“.

Der Einführung in die physikalischen Grundlagen dienen 53 Seiten. Mathematische Fertigkeiten werden nicht