

Supraleitende neuronale Netze? Besser erst Quanten!

Quanten. Begriffe und Konzepte für Chemiker. Von *P. W. Atkins*. VCH Verlagsgesellschaft, Weinheim, 1993. 427 S., geb. 128.00 DM/Broschur 68.00 DM. – ISBN 3-527-29082-6/3-527-28423-0

Das Buch beginnt mit der ausführlichen Beantwortung der Frage: Wozu und für wen ist dieses Werk geschrieben worden? Beabsichtigt ist eine bildhafte, weitgehend auf mathematische Formalismen verzichtende Darstellung von quantenmechanischen Begriffen. Zielgruppe sind alle Nicht-Quantenchemiker, die sich unbeschwert und zügig einen quantenchemischen Begriff klarmachen wollen. Dem Konzept eines Nachschlagewerkes folgend sind die Begriffe deshalb nicht inhaltlich, sondern alphabetisch geordnet. Der fehlende inhaltliche Faden wird ersetzt durch zahlreiche Querverweise und ein abschließendes detailliertes Stichwortverzeichnis. Die Erläuterungen zu den quantenmechanischen Begriffen sind in bewußt einfacher Sprache gehalten und mit zahlreichen Illustrationen versehen. Kann gar nicht auf ein Mindestmaß an mathematischen Grundlagen verzichtet werden, so sind diese in optisch abgesetzten Abschnitten untergebracht. Komplettiert wird das ganze durch eine umfangreiche, aktuelle Bibliographie. Die ersten und letzten Seiten des Buches enthalten Tafeln mit nützlichen Beziehungen



und Konstanten und dem Periodensystem.

Insgesamt also ein „Atkins“ für das Gebiet der Quantenmechanik mit der gewohnt gekonnten Darstellung in Wort und Bild. Der ungewöhnliche Aufbau des Buches vermittelt zuerst den Anschein, als handele es sich hier nur um eine Art Notizbuch oder Schlagwortliste. Aber wer würde nicht gern einmal in Atkins' persönlichem Notizbuch blättern? Die klare Strukturierung bewirkt zusammen mit der souveränen Darstellungsweise einen wesentlich einfacheren Zugang zu quantenchemischen Begriffen, als dies vielen ausgesprochenen Lehrbüchern gelingt, ohne den Sachverhalt zu trivialisieren. Seinen größten Wert beweist „Quanten“ sicherlich im Gespann mit Atkins' „Molecular Quantum Mechanics“, auf das häufig hinsichtlich detaillierterer Darstellungen verwiesen wird. Zusammen mit den Hinweisen auf weiterführende Literatur ist somit eine Eindringtiefe in genau gewünschtem Maße möglich. Glücklicherweise hat das Buch bei der Übertragung ins Deutsche nur wenig verloren. Nur in den separaten Abschnitten, die die mathematischen Grundlagen enthalten, sind einige typographische Fehler zu finden. So wird auf Seite 19 in Kasten A.2 das Austauschintegral im Text mit κ und in der Formel dann mit k bezeichnet, auf Seite 110 in Kasten F.1 in der allgemeinen Formel für f-Orbitale die Variable V und in der anschließenden Liste dann y verwendet; auf Seite 294 in Kasten S.3 wird das Symbol ρ statt σ für die Boltzmann-Konstante aufgeführt, und auf S. 351 in Kasten V.1 hat sich in die Formel für das Coulomb-Integral ein zusätzliches S eingeschlichen. Einige Male werden auch große und kleine griechische Buchstaben verwechselt: λ - oder Λ -Verdopplung auf den Seiten 360 und 362; π -Term und Π -Term auf Seite 359. Die alphabetische Anordnung des Inhalts sowie die Verwendung zusammen mit anderen, in der Regel englischsprachigen Quellen offenbart natürlich doch die generelle Problematik einer deutschen Fassung. Die Verwendung allgemein üblicher Bezeichnungen wie „self-consistent field“ und die Aufnahme einiger englischer Begriffe in den sonst deutschen Index (z.B. „closure approxi-

mation“ als Hinweis auf die Näherung geschlossener Summen) entschärft die Situation zwar etwas. In diesem Punkt hätte man den Übersetzern aber doch noch mehr Mut gewünscht, denn kaum jemand wird unter „Verrutschen von Elektronen“ nachschlagen, ohne bereits eine präzise Vorstellung dieses Begriffs zu haben.

Es bleibt die Frage, ob die angesprochene Zielgruppe den Weg zu diesem Buch finden wird. Dem Titel nach dürfte es eher den Personenkreis ansprechen, der ausdrücklich nicht gemeint ist. Es ist aber zu hoffen, daß der Name des Autors möglichst vielen Chemikern und Studierenden genügt, um einmal einen (langen!) Blick in dieses Buch zu werfen.

Hendrik Zipse

Institut für Organische Chemie
der Technischen Universität Berlin

Neural Networks for Chemists. An Introduction. Von *J. Zupan* und *J. Gasteiger*. VCH Verlagsgesellschaft, Weinheim/VCH Publishers, New York, 1993. 305 S., geb. 138.00 DM; Broschur 68.00 DM. – ISBN 3-527-28592-X/1-56081-791-7; 3-527-28603-9/1-56081-793-3

Es ist eine schwere Aufgabe, grundlegende Konzepte einer neuen interdisziplinären Forschungsrichtung präzise zu formulieren und einem breiten Leserkreis zugänglich zu machen. Jure Zupan und Johann Gasteiger ist dies in überzeugender Weise gelungen. Nicht nur Chemikern, sondern auch anderen Naturwissenschaftlern wird eine fundierte Einführung mit tiefen Einblicken in die Architektur, Funktionsweise und Anwendung künstlicher neuronaler Netze geboten; dabei werden sehr deutlich die grundsätzlichen Einsatzmöglichkeiten und die Limitierungen verschiedener Systeme miteinander verglichen und bewertet. Die Autoren haben sich auf eine sinnvolle Auswahl klar differenzierbarer Netztypen beschränkt. Sie erläutern deren Verwendung zur Klassifikation, Modellierung und Analyse von Molekülen und ihren Eigenschaften, zur Berechnung von Abbildungen (z.B. zur Auswertung von Spektren oder zur Ana-

Diese Rubrik enthält Buchbesprechungen und Hinweise auf neue Bücher. Buchbesprechungen werden auf Einladung der Redaktion geschrieben. Vorschläge für zu besprechende Bücher und für Rezensenten sind willkommen. Verlage sollten Buchankündigungen oder (besser) Bücher an den Buchredakteur Dr. Ralf Baumann, Redaktion Angewandte Chemie, Postfach 101161, D-69451 Weinheim, Bundesrepublik Deutschland, senden. Die Redaktion behält sich bei der Besprechung von Büchern, die unverlangt zur Rezension eingehen, eine Auswahl vor. Nicht rezensierte Bücher werden nicht zurückgesandt.

lyse von Struktur-Funktions-Beziehungen) und zur Kontrolle chemischer Reaktionen. Das Buch liest sich leicht und ist gut strukturiert. Kurze Zusammenfassungen der Lernziele am Anfang eines jeden Kapitels und eine einprägsame Formulierung von Merksätzen erleichtern das Lernen mit diesem Buch, das einen theoretischen Teil und die Beschreibung verschiedener Anwendungsmöglichkeiten enthält. Dies eröffnet dem Leser nach der aussagekräftigen Einführung in das Thema die Möglichkeit, die aufgeführten Beispiele hinsichtlich der Auswahl der Methodik kritisch zu beurteilen und möglicherweise auch selber einen alternativen Lösungsansatz zu finden. Besonders hervorzuheben sind die Kapitel über die Kohonen-Netze und die Counterpropagation-Systeme. Die Anwendungsbeispiele, etwa die Abbildung des dreidimensionalen elektrostatischen Potentials eines Moleküls auf einer zweidimensionalen Karte mit dem Kohonen-Ansatz, überraschen zunächst durch ihr einfaches Konzept, doch zeigt sich gerade darin eine Stärke künstlicher neuronaler Systeme. Solche Prinzipien werden auch im Hinblick auf die sinnvolle Auswahl repräsentativer Daten für die Analyse durch neuronale Netze knapp und verständlich erläutert. Der Leser wird nicht durch eine Flut an Zitaten von den Kernaussagen abgelenkt, sondern findet eine nützliche Literatursammlung am Ende jedes Kapitels.

Es sind nach unserer Meinung nur wenige Aspekte neuronaler Netze noch nicht hinreichend berücksichtigt worden: Effizienten Algorithmen zur systematischen Optimierung von Netzarchitekturen – etwa genetischen Algorithmen – wird keine Aufmerksamkeit geschenkt; auch die Beschränkung auf den Backpropagation-Algorithmus für mehrlagige Netze gibt nur einen Teil (bei weitem den größten) des Spektrums zuverlässiger Strategien für überwachtetes Lernen wieder. Ähnliches gilt für die Auswahl der Anwendungsbeispiele: So stellen die Autoren die Analyse von biologischen Makromolekülen nur am Rande vor und beschränken sich auf die Vorhersage der räumlichen Struktur von Proteinen aus deren Aminosäuresequenz. Hier wären weitere Beispiele – etwa die Auswertung von Datenbanken mit neuronalen Netzen – durchaus angebracht, da diese Methoden bereits deutlich fortgeschritten sind und massiv

weiterentwickelt werden. Solche Ergänzungen können aber sicherlich in einer zweiten Auflage des Buches eingefügt werden. Wegen der hohen inhaltlichen und formalen Qualitäten ist eine große internationale Verbreitung dieses durchweg gelungenen und wegweisenden Lehrbuchs zu erwarten.

Gisbert Schneider, Paul Wrede
Institut für Medizinische/
Technische Physik
und Lasermedizin
der Freien Universität Berlin

Organic Superconductors (Including Fullerenes). Synthesis, Structure, Properties and Theory. Herausgegeben von J. M. Williams et al. Prentice Hall, Englewood Cliffs, NJ (USA), 1992. 400 S., geb. 91.10 \$. – ISBN 0-13-640566-5

Die meisten Autoren des vorliegenden Buches sind Mitarbeiter des Argonne National Laboratory in Illinois. Sie sind international führende Kapazitäten auf dem Gebiet der organischen Supraleiter und sind auch in der organischen und anorganischen Werkstoffchemie, der Theoretischen Chemie, Spektroskopie, Röntgenkristallographie und der Feststoffphysik bewandert. Gemeinsam liefern sie einen hervorragenden, aktuellen Überblick über die organischen Supraleiter und die damit verwandten nichtpolymeren, hochleitenden organischen Verbindungen (leitende Polymere sind nicht erwähnt). Das Buch möchte Fachleute aus der Forschung sowie interessierte Laien ansprechen. Besprochen werden kristalline Charge-Transfer-Salze, die durch die Kombination spezifischer organischer π -Donoren oder π -Acceptoren entstehen. Seit der Entdeckung des ersten organischen Supraleiters 1979 besteht unverändert großes Interesse an diesem vielschichtigen Forschungsgegenstand. Derzeit sind ungefähr 70 organische Supraleiter bekannt; darunter verzeichnen die Fullerene die höchsten Übergangstemperaturen (bis zu 33 K).

Das Buch hat acht Kapitel und drei Anhangskapitel. Im Mittelpunkt stehen die organische Synthese der Elektronendonator- und -acceptorbausteine, die Struktu-

ren dieser Moleküle und ihrer Salze, ihre elektrischen und supraleitenden Eigenschaften sowie spektroskopische, magnetische und theoretische Untersuchungen. Sorgfältig ausgewählte Literaturverweise finden sich am Ende jedes Kapitels. Das Buch ist sorgfältig aufgemacht, und der Rezensent hat keine inhaltlichen oder typographischen Fehler entdecken können. Sehr nützlich sind die Diagramme (besonders der Röntgenkristallstrukturen) und Datentabellen, die den Bezug zwischen strukturellen, elektrischen und magnetischen Eigenschaften etwas unterschiedlich aufgebauter Salze verdeutlichen. Zusammenhänge zwischen den einzelnen Feststoffeigenschaften werden betont, zum Beispiel wird die Schlüsselrolle der Kristallstapelungsmuster hinsichtlich der Übergangstemperatur zur Supraleitfähigkeit detailliert erläutert.

Das Buch behandelt hauptsächlich Tetrachalkogenfulvalensysteme. Supraleitende Salze von Fullerid-Anionen werden im Anhang kurz angesprochen; da dieser Teil aber hauptsächlich auf der Literatur von 1991 basiert, wird er schnell überholt sein. Außerdem findet sich eine Liste mit den Namen und Adressen von Wissenschaftlern, die sich mit der Supraleitfähigkeit organischer Verbindungen befassen – allerdings ist nicht ganz klar, nach welchen Kriterien diese Liste erstellt worden ist! Das Buch schließt mit einem guten Verzeichnis der wesentlichen im Text vorkommenden Substanzen und Themen.

Im vergangenen Jahrzehnt hat das Gebiet der organischen Supraleiter so drastische und oft unerwartete Erfolge gezeigt, daß es schier unmöglich scheint, die weitere Entwicklung abzusehen. Zweifellos lassen sich aber noch lange interessante neue experimentelle und theoretische Erkenntnisse erwarten. Eins der Hauptziele ist die Synthese organischer Produkte mit Übergangstemperaturen von mehr als 100 K, die mit keramischen Supraleitern konkurrieren können. Das vorliegende Buch ist die derzeit beste einbändige Informationsquelle zu diesem Thema, und es hat einen maßgebenden Platz innerhalb der schnell wachsenden Literatur über organische Supraleiter verdient.

M. R. Bryce
Department of Chemistry
University of Durham
Durham (Großbritannien)