

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

Diese Rubrik enthält Buchbesprechungen und Hinweise auf neue Bücher. Buchbesprechungen werden auf Einladung der Redaktion geschrieben. Vorschläge für zu besprechende Bücher und für Rezessenten 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.

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 im 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 detaillierter 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 x 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-