

auf diesem Gebiet. Die Ursachen dafür sind in der Einleitung des vorliegenden Buches sehr gut allgemein erläutert und werden immer wieder durch die vielen vorgestellten Beispiele verdeutlicht.

Das Werk ist eine kritische Zusammenfassung der wesentlichen Ergebnisse zur Oberflächenphysik und -chemie von einkristallinen Oxiden. Behandelt werden viele Beispiele mit Hauptgruppenoxiden von Magnesium, Aluminium, Zink und Zinn (Siliciumoxid wird als Nichtmetalloxid ausgeschlossen) und Nebengruppenoxiden von Titan, Vanadium und Eisen. Weitere Oxide wurden berücksichtigt, soweit sich genügend Literaturbeispiele finden ließen. Bedauerlicherweise werden die Alkalimetalloxide, die sich thematisch sehr gut in den Rahmen des Buches einfügen würden, wohl wegen des Mangels an Beispielen mit „Einkristallen“ nicht erwähnt. Ebenso werden dünne Schichten von Metalloxiden mit einkristallinen Oberflächen nicht behandelt, obwohl es sich hierbei um ein gerade sehr im Aufschwung befindliches Arbeitsgebiet handelt.

Die behandelten Oxide werden dafür um so gründlicher vorgestellt. Nach einer kurzen Einführung in die Idealstrukturen werden die elektronischen Eigenschaften der Haupt- und Nebengruppenmetalloxide ausführlich auf hohem Niveau behandelt. Vorangestellt ist ein Kapitel über die zugehörigen Gitterschwingungen, die die physikalischen Eigenschaften der Oberflächen wesentlich beeinflussen. Im Anschluß folgen zwei große Kapitel über die Oberflächenchemie von Molekülverbindungen und deren Grenzflächenreaktionen mit anderen Oxiden und Metallen. Die hier angesiedelte Behandlung der Themen Heterogene Katalyse und Keramische Supraleiter ist allerdings eher als Streifschuß denn als Volltreffer aufzufassen.

Besonders auffallend an diesem Werk ist, daß chemische und physikalische Aspekte gleichermaßen kompetent und gründlich behandelt werden. Der Leser muß daher über Vorkenntnisse in beiden Disziplinen verfügen; es handelt sich um kein einführendes Werk. Ein Charakteristikum interdisziplinärer Forschung, die unterschiedliche Verwendung gleicher Terminologie, wird mehrfach herausgearbeitet und jeweils erklärt. Ein besonders gelungenes Beispiel sind die Definitionen des Begriffs Hybridisierung auf S. 104.

Von kaum zu überschätzendem Wert ist die erschöpfende Auswertung der einschlägigen Literatur, die teilweise in außerordentlich informativen Tabellen zusammengefaßt ist. Dadurch wird das Buch zu einem Nachschlagewerk des auf

diesem Gebiet tätigen Forschers. Hier geht das Buch weit über den Rahmen einer Monographie hinaus und wird zum Standardwerk.

Diesen Anspruch erfüllen auch die ausführlich bebilderten Beispiele, die in wichtigen Fällen, wie der Oberflächenchemie von Titandioxid (Kap. 6.4) so ausführlich sind, daß man in der Primärliteratur kaum weitere Aspekte finden wird. Die knapp 1000 Literaturstellen, ein gut gegliedertes Inhaltsverzeichnis sowie Schlagwort- und Verbindungsindizes erhöhen den Gebrauchswert als Referenzquelle zusätzlich.

Nachteilig ist die nicht immer konsequente Verweisdichte: Oft sucht man längere Zeit nach dem Zitat zu einem beschriebenen Sachverhalt. Nicht ganz zutreffend ist ferner die Angabe, daß dieses Buch das erste seiner Art sei. Zwar werden zwei weitere Werke in der Einleitung behandelt, doch andere einschlägige Monographien wie die von Nowotny und Dufour werden im Text nicht erwähnt.

Insgesamt handelt es sich um ein außerordentlich nützliches Werk, das ein Wissensgebiet kompetent und zuverlässig zusammenfaßt. Es kann als Standardwerk empfohlen werden und wird jedem auf dem Gebiet Tätigen ein zuverlässiger Ratgeber sein. Die allgemeinen Aussagen des Buches sind durchaus anregend beim Entwurf eigener Forschungsprojekte auf dem Gebiet der „Surface Science“, das gegenwärtig erheblich an Aktualität gewinnt. Der Stil der Darstellung, die instruktiven Abbildungen und nicht zuletzt die hervorragende Verarbeitung machen das Buch auch zu einem Lesebuch für den auf Nachbargebieten, wie Festkörperphysik, Oxidchemie, Materialforschung oder Katalyse, tätigen Forscher. Bibliotheken sei es wärmstens als zusammenfassende und langlebige Monographie empfohlen.

Robert Schlögl

Fritz-Haber-Institut  
der Max-Planck-Gesellschaft,  
Berlin

**A New Dimension to Quantum Chemistry. Analytic Derivative Methods in Ab Initio Molecular Electronic Structure Theory.** Von Y. Yamaguchi, Y. Osamura, J. D. Goddard und H. F. Schaefer. Oxford University Press, Oxford, 1994. 471 S., geb. 60.00 £. – ISBN 0-19-507028-3

Es ist wohl keine Übertreibung, wenn im Titel des vorliegenden Buches die Entwicklung der analytischen Ableitungen für ab-initio-Wellenfunktionen als eine

neue Dimension in der Quantenchemie bezeichnet wird. Seit den bahnbrechenden Arbeiten von P. Pulay Ende der sechziger Jahre hat vor allem die Möglichkeit mit analytischen Gradienten, Gleichgewichtsstrukturen und Sattelpunkte zuverlässig zu bestimmen, den Stellenwert quantenchemischer ab-initio-Rechnungen deutlich erhöht. Aber auch die Berechnung von harmonischen Schwingungsfrequenzen, anharmonischen Korrekturen, IR- und Raman-Intensitäten und vielem mehr ist erst durch die Entwicklung und effiziente Implementierung von Algorithmen zur analytischen Berechnung von Ableitungen des Energieausdrucks möglich geworden. Eine Reihe von Übersichtsartikeln und Aufsatzsammlungen sind zu diesem Thema bereits erschienen; die mit Abstand ausführlichste Darstellung haben jedoch Schaefer et al. mit dem vorliegenden Werk vorgelegt. Auf über 450 Seiten werden, ausgehend von einer knappen Einführung in den LCAO-MO-Formalismus, die expliziten Ausdrücke für die ersten und zweiten Ableitungen für unterschiedliche Hartree-Fock(HF)-SCF-Wellenfunktionen sowie für Wellenfunktionen aus Konfigurationswechselwirkung (CI), Zwei-Konfigurations-SCF und allgemeinem Multikonfigurations-SCF(MCSCF) hergeleitet. Die anschließenden Kapitel beschreiben im Detail die Lösung der „Coupled Perturbed“-HF-, CI- oder MCSCF-Gleichungen. Daran schließt sich eine Diskussion höherer Ableitungen sowie der Spezialfall der Ableitungen nach einem elektrischen Feld an. Ein kurzes Kapitel über die erst kürzlich von Handy und Schaefer entwickelte „Z-Vektor“-Methode zur Berechnung analytischer Ableitungen beschließt den mathematischen Teil des Buches. Im vorletzten Kapitel beschreiben die Autoren einige typische Anwendungen von analytischen Ableitungen zur Beantwortung chemischer Fragestellungen, bevor sie schließlich im letzten, dem 20. Kapitel, einen optimistischen Ausblick auf zukünftige Entwicklungen geben. Es folgen 28 Appendices, in denen die Kerngleichungen aus allen Kapiteln zusammengefaßt werden. Den Schlußpunkt des Buches markiert eine Zusammenstellung der relevanten Originalliteratur, die in erfreulicher Aktualität bis in das Jahr 1993 reicht.

Das Buch ist von ansprechender formaler Aufmachung, wie man es von den anderen Bänden dieser Reihe gewöhnt ist. Bereits bei einem ersten Überfliegen fällt jedoch der selbst für eine theoretisch ausgerichtete Monographie ungewöhnlich hohe Anteil an mathematischen Ausdrücken auf. Strenggenommen ist das Werk

eine, nur durch wenige Wörter aufge-lockerte Formelsammlung. Die Struktur der Kapitel ist starr und stark formalisiert. Kapitel, die verwandte Aspekte behandeln, haben einen fast identischen Aufbau, selbst die Formulierungen unterscheiden sich kaum. All dies macht das Buch zu einer sehr spröden und trockenen Lektüre. Für wen könnte dieses Buch von Nutzen sein? Ob für die im Vorwort anvisierte Zielgruppe der fortgeschrittenen Studenten scheint eher zweifelhaft, dazu ist die Darstellung zu kompakt und der Umfang der präsentierten Algebra zu erdrückend, verglichen mit der nur spärlichen Einbettung des Themas in einen größeren Zusammenhang. Für den Experten hingegen kann der Band sicherlich gewinnbringend als Nachschlagewerk dienen. Dabei ist allerdings einschränkend anzumerken, daß sich die Autoren vornehmlich auf die Diskussion ihrer eigenen Arbeiten konzentrieren, so daß neben dem Hartree-Fock-Fall vor allem die Ableitungen von CI- und MCSCF-Energieausdrücken im Mittelpunkt des Interesses stehen. Eine Besprechung der populären störungstheoretischen Ansätze fehlt leider ebenso wie die der immer mehr an Bedeutung gewinnenden Coupled-Cluster-Verfahren. Insofern bleibt letztlich nur ein exklusiver Kreis von Theoretikern, dem dieses Buch empfohlen werden kann.

Wolfram Koch

Institut für Organische Chemie  
der Technischen Universität Berlin

**Dictionary of Gene Technology.** Von G. Kahl. VCH, Weinheim, 1994. 550 S., geb. 184.00 DM. – ISBN 3-527-30005-8

Es ist eine unumstrittene Tatsache, daß die Bedeutung der Gentechnologie zunächst in den Vereinigten Staaten erkannt und ihre Anwendung vor allem dort vorangetrieben wurde. Damit einhergehend entstand eine Welt von englischen Begriffen, die fester Bestandteil der Alltagssprache der Molekularbiologen geworden ist. Vielen von uns ist es schon zugestoßen,

daß er das deutsche Synonym für einen englischen Fachausdruck aus der Gentechnologie oder der Molekularbiologie nicht sofort verfügbar hatte. Manche Ausdrücke lassen sich gar nicht übersetzen, denn dem Erfinder ist es vorbehalten, einen Namen für sein Kind vorzuschlagen. In vielen Fällen besteht dieser Name aus einer Abkürzung.

Das „Dictionary of Gene Technology“ trägt dieser Entwicklung Rechnung und ist ein Versuch, die sich rasch entwickelnde Flut von Begriffen, Namen und Abkürzungen für Techniken, Verfahren, Substanzen, Materialien sowie biologische Makromoleküle in der englischen Sprache zu erfassen und zu erklären. Welche Begriffe gehören in ein Lexikon der Gentechnologie und wie detailliert können diese erläutert werden? In vielen Fällen ist hier sicherlich keine leichte Entscheidung möglich. Der Schwerpunkt liegt auf Stichworten, die im weitesten Sinne mit Nucleinsäuren und deren Aufbau, Analyse, Synthese, Transfer, Modifikation sowie Prozessierung zu tun haben. Viele Termini gehen über den Bereich der Gentechnologie hinaus, ohne Anspruch auf Vollständigkeit in verwandten Gebieten erheben zu können. Es entstand eine beeindruckende Sammlung von Fachbegriffen, die meist kurz und verständlich, manchmal etwas ausführlicher, jedoch nie langatmig, und fast ausschließlich richtig erläutert werden. Der Autor wendet sich an eine breite Leserschaft, vor allem an aktive Wissenschaftler in den entsprechenden Disziplinen und ihre Studenten, aber auch an Experten aus angrenzenden Bereichen, sowie an Journalisten und Politiker. Für interessierte Laien ist das Buch nicht einfach zu verstehen, denn es stützt sich auf die spezifische Begriffs- und Zeichensprache der Molekularbiologen. Der überwiegende Teil der Zielgruppe, nicht zuletzt wegen der unterschiedlichen Ausbildung, kann allerdings aus diesem Buch Nutzen ziehen. Einfache und übersichtliche Zeichnungen, das Anführen von Beispielen aus der Praxis und weiterführende Erläuterungen tragen wesentlich dazu bei.

Man wird ein Lexikon nicht lesen, doch zum Durchblättern wird man wegen der

vielen Querverweise sanft überredet. Auf den ersten Blick irritieren manche Absätze, in denen diese Querverweise – angezeigt durch kleine Pfeile – das Druckbild dominieren. Bei genauerem Hinsehen erweisen sie sich jedoch als sehr hilfreich, da zum einen so Begriffe vernetzt werden und es zum anderen gelingt, diese in größere Zusammenhänge einzubinden. Ein Lexikon kann und soll nicht das Lehrbuch oder das praktische Handbuch ersetzen. Es erläutert das Prinzip einer Technik, erinnert an eine Formel, zeigt die Struktur eines Moleküls oder verrät die Bedeutung einer Abkürzung. Es ist ein Nachschlagewerk, hilft Dinge ins Gedächtnis zu rufen oder Lücken zu schließen. Diesen Ansprüchen wird das Buch gerecht.

Es wird sicherlich nicht einfach sein, mit einem gedruckten Buch mit zukünftigen Entwicklungen Schritt zu halten. Schon jetzt sind einige wichtige und durchaus aktuelle Techniken, wie „Two-hybrid system“, „Interaction trap“ und „Knock out animal“, nicht beschrieben. Das ist umso erstaunlicher, als der Autor Erläuterungen für neue technologische Entwicklungen im Vorspann ankündigt. Mancher wird sicherlich noch weitere Begriffe vermissen. Auch könnten manche Definitionen („Gene expression“, „Repressor“) noch verbessert oder erweitert werden. Einige Stichworte mögen zu kurz (z.B. „Gene“, ausgerechnet bei „Gene technology“ wird querverwiesen) oder zu trocken diskutiert worden sein.

Ein Lexikon enthält grundsätzlich Informationen, die an anderer Stelle vollständiger und anschaulicher erläutert werden. Sein Vorteil liegt in der Handlichkeit; es bietet die Möglichkeit des raschen Zugriffs. Auch erscheint es als eine schier unlösbare Aufgabe für nur einen Autor, ein solches Buch vollständig und fehlerfrei zu verfassen. Insgesamt ist dies allerdings im vorliegenden Fall gelungen. Es ist ein umfassendes, ausgewogenes und nützliches Buch entstanden, das sicherlich seinen Platz auf den Schreibtischen und in den Laboratorien finden wird.

Michael Meisterernst

Laboratorium für Molekulare Biologie-Genzentrum der Universität München