

**Fachwörterbuch Chemie und Chemische Technik – Englisch-Deutsch**

Herausgegeben von der Technischen Universität Dresden. Langenscheidt Fachverlag, München 2003. 703 S., geb., 99.00 €.— ISBN 3-86117-206-2

Komplizierte Sachverhalte, wie sie uns in der Chemie ständig begegnen, müssen in einer möglichst verständlichen, entschlüsselbaren Sprache präsentiert werden. Unpräzise Übersetzungen englischer Termini, auf die sich der Eingeweihte vielleicht noch einen Reim machen kann, können einen Text für die meisten Leser unverständlich werden lassen. Der Griff zu einem Wörterbuch wie dem vorliegenden kann helfen, richtig zu übersetzen.

Bereits in der 7. Auflage erscheint im Verlag Langenscheidt das *Fachwörterbuch Chemie und chemische Technik (Englisch-Deutsch)*, das bei 2000 Neueinträgen nun über einen Wortschatz von 65 000 Fachbegriffen verfügt; Herausgeber ist die TU Dresden, die aktuelle Auflage wurde von Karl-Friedrich Arndt bearbeitet. Alle Bereiche der Chemie, von der Theoretischen Chemie über die klassischen Fachgebiete der Organik, Anorganik und Physikchemie bis hin zu unterschiedlichen Zweigen der chemischen Verfahrenstechnik, deren Vokabular vielfach kaum geläufig sein dürfte, sind gründlich abgedeckt. Das Wörterbuch richtet sich nicht nur an Fachleute und Übersetzer, sondern auch an Journalisten,

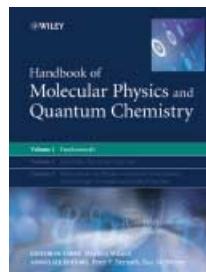
Studenten und Angehörige unterschiedlichster Berufszweige, die mit englischsprachigen Chemiefachtexten in Berührung kommen.

Die Einträge sind mit zahlreichen Kurzdefinitionen und Fachgebetsangaben versehen, die insbesondere bei mehrdeutigen Begriffen hilfreich sind. Auch für schwierig zu übersetzende Ausdrücke, um die manch anderes Wörterbuch klammheimlich einen Bogen macht (man versuche einmal, Begriffe wie „bulk liquid“ oder „no-bond resonance“ zu recherchieren), wird eine Lösung angeboten. Auf die Angabe von Lautschrift und Silbentrennung wurde verzichtet, was aber gewiss kein Nachteil ist, da der potenzielle Nutzerkreis dieses Wörterbuchs mit den Grundzügen des Englischen hinlänglich vertraut sein dürfte; außerdem bleibt das Buch damit noch einigermaßen handlich. Hervorzuheben ist die Vielzahl von Akronymen und Abkürzungen, die entweder unmittelbar erklärt werden oder mit einem Verweis auf das Stammwort versehen sind.

Eine kleine Kuriosität hält der Anhang bereit, der neben einer Liste von chemischen Elementen und Einheitsymbolen auch einen Abschnitt über die Lesart chemischer Formeln und mathematischer Ausdrücke enthält. Darin erfährt man unter anderem, dass H_2O „h zwei o“ oder Cu^{2+} „c u zwei plus“ ausgesprochen wird! Dieser Service wird von einem ausgebildeten Chemiker zwar nicht benötigt werden, dürfte aber für Fachfremde sehr wertvoll sein.

Wer kein entsprechendes Wörterbuch besitzt oder sein veraltetes ersetzen will (auch die Fachsprache ist dem Wandel unterzogen), dem kann das *Fachwörterbuch Chemie und chemische Technik* uneingeschränkt empfohlen werden.

Frank Maäß
Redaktion Angewandte Chemie
Weinheim

Handbook of Molecular Physics and Quantum Chemistry

Band 1–3. Herausgegeben von Stephen Wilson, Peter F. Bernath und Roy McWeeny. John Wiley & Sons, New York 2003. XL + 2332 S., geb., 1149.00 €.—ISBN 0-471-62374-1

Ziel dieses dreibändigen Handbuchs ist es, einen vollständigen Überblick über die theoretischen Konzepte und Rechenverfahren zu geben, die zur Beschreibung molekularer Systeme entwickelt worden sind. Jeder Band enthält etwa 35 Kapitel, die in verschiedene Themenbereiche gruppiert sind. Am Ende jedes Bandes findet sich ein Register, am Ende des dritten Bandes zusätzlich noch ein Stichwortverzeichnis, das alle drei Bände abdeckt.

Band 1 mit dem Untertitel „Fundamentals“ besteht aus 40 Kapiteln und ist im Wesentlichen ein Lehrbuch der molekularen Quantenmechanik. Nach einer Einleitung mit einer nützlichen Sammlung von Maßsystemen, Naturkonstanten und Umrechnungsfaktoren folgen Kapitel auf recht elementarem Niveau. Dieser Band geht meist nicht über den Inhalt klassischer Lehrbücher hinaus. Davon ausgenommen sind lediglich Kapitel 4 (Gruppentheorie) und Kapitel 6 zur näherungsweisen Trennung von Kern- und Elektronenbewegung.

Im zweiten Band, „Molecular Electronic Structure“, werden vor allem Näherungsverfahren zur Lösung der Schrödinger- (oder Dirac-Coulomb-) Gleichung für ein isoliertes Molekül behandelt. Am Anfang wird eine allgemeine Übersicht über Näherungsverfahren und ihr Konvergenzverhalten gegeben. Hier werden auch Variationsverfahren im zeitunabhängigen Fall vorgestellt. Es folgt ein Abschnitt über Valence-Bond-Methoden. Man hätte noch ausführlicher die Analyse von (mit Molekülorbital-Methoden berechneten) Wellenfunktionen durch Zerlegung in Valence-Bond-Strukturen behandeln können, wodurch diese Ver-

fahren auch in der konventionellen Quantenchemie bekannter würden. Der nächste Abschnitt ist der Elektronenkorrelation gewidmet, die ja bekanntlich eine zentrale Größe in der Quantenchemie darstellt. Nach einer Beschreibung des Phänomens durch Zweiteilchen-Dichten und einem Kapitel über „exakte“ Rechnungen an Systemen mit zwei und vier Elektronen folgen drei Kapitel über die Konfigurationswechselwirkung, Coupled-Cluster-Methoden und die Vielteilchen-Störungstheorie. Im letzten Kapitel habe ich die Beschreibung der sehr erfolgreichen Multireferenz-Varianten wie CASPT2 vermisst. Diese drei Kapitel bieten aber dennoch eine sehr ausführliche, über den Lehrbuchstoff hinausgehende Darstellung der Themen. Der Abschnitt über relativistische Rechenverfahren konzentriert sich auf vierkomponentige selbstkonsistente Methoden. Ein Kapitel über quasirelativistische (zweikomponentige) Hamiltonoperatoren fehlt (etwas in der Richtung findet sich merkwürdigerweise in Band 1, an einer Stelle wo es nicht hingehört). Der fünfte Abschnitt, „Electronic Structure of Large Molecules“ ist enttäuschend: Außer einem sehr gelungenen Kapitel über semiempirische Rechenverfahren finden sich lediglich Kapitel über die Thomas-Fermi-Theorie (inkl. Erweiterungen) und Dichtefunktionalverfahren. Diese beiden Kapitel passen nicht in diesen Abschnitt, und das Kapitel über Dichtefunktionalverfahren sollte mit einem Kapitel, das zum gleichen Thema (und vom gleichen Autor) an früherer Stelle in diesem Band erscheint, zusammengefaßt werden. Auf der anderen Seite wird die stürmische Entwicklung der Quantenchemie für große Moleküle, die wir in den letzten zehn Jahren erleben

durften, schlichtweg ignoriert. Kapitel über schnelle Multipol-Verfahren zur Berechnung der Coulomb-Energie oder über die Berechnung der Korrelationsenergie mit lokalisierten Molekülorbitalen dürften in diesem Handbuch nicht fehlen. Der sechste Abschnitt dieses Bandes befasst sich mit technischen und praktischen Aspekten der Quantenchemie (Basissätze, Berechnung molekularer Integrale) und der siebente Abschnitt mit der Analyse und Interpretation berechneter Wellenfunktionen, unter anderem mit der topologischen Analyse der Elektronendichte.

In Band 3 des Handbuchs stehen theoretische Methoden zur Beschreibung der Wechselwirkung eines Moleküls mit seiner Umgebung im Mittelpunkt des Interesses. Im ersten Abschnitt wird das elektromagnetische Feld abgehandelt. Das Kapitel über elektrische und magnetische Eigenschaften ist gut gelungen. Es fällt aber unangenehm auf, dass der Autor das Gaußsche Maßsystem benutzt und nicht, wie im übrigen Teil des Handbuchs, SI-basierte Einheiten verwendet. Dadurch unterscheiden sich z.B. die Maxwell-Gleichungen in diesem Kapitel von denen, die an anderer Stelle im Handbuch diskutiert werden. Zwischenmolekulare Wechselwirkungen werden in einem zweiten Abschnitt behandelt, und Moleküle in Lösung, im Festkörper und an Oberflächen sind Gegenstand des darauf folgenden Abschnitts. Ausführungen zu Elektronen- und Schwingungs-Rotations-Spektren, Streutheorie und ein Abschnitt über Virialkoeffizienten und Transporteigenschaften realer Gase runden den dritten Band ab.

Um ein solch umfangreiches Handbuch wirklich gut nutzen zu können, muss das Register nahezu vollständig sein. Unter dem Stichwort „basis set

superposition error“ findet man mehrere Textstellen, aber eben nicht die, wo dieses Phänomen wirklich erörtert wird (Kapitel 28 in Band 2). Dies ist natürlich nur eine Stichprobe, es darf bei einem derart wichtigen Thema aber nicht vorkommen.

Insgesamt betrachtet legt das Handbuch auf die theoretischen Konzepte einen größeren Wert als auf praktische Fragen. Es ist bei weitem kein „Rezeptbuch“ der Quantenchemie. Beispielsweise wird im Kapitel über Coupled-Cluster-Methoden die sog. T1-Diagnose nicht erwähnt, die einen wichtigen Hinweis zur Anwendbarkeit des Verfahrens liefert. Obwohl das Problem der Eichabhängigkeit bei der Berechnung magnetischer Eigenschaften erwähnt wird, werden die GIAO- und IGLO-Methoden zur Lösung dieses Problems nicht beschrieben. Ebenso fehlt ein Kapitel über Rumpfpotentiale (Pseudopotentiale). Das Handbuch kann eine ganze Sammlung guter Lehrbücher ersetzen. Wer eine solche Sammlung schon hat, für den bleiben zwei Gründe, das Handbuch zu kaufen: Erstens ist es eine einheitliche Quelle, die über ein einziges Sachregister erschlossen werden kann, und zweitens gibt es zurzeit kein aktuelles Lehrbuch der Theoretischen Chemie, das die Entwicklung der letzten zwei Jahrzehnte kompetent darstellt. Dadurch ist eine große Lücke zwischen Lehrbuchwissen und der wissenschaftlichen Literatur entstanden. Ein Verdienst des vorliegenden Handbuchs besteht darin, diese Lücke geschlossen zu haben.

Christoph van Wüllen
Institut für Chemie
Technische Universität Berlin, Berlin

DOI: 10.1002/ange.200385046