

Recensio

ROBERT G. PARR: The Quantum Theory of Molecular Electronic Structure.

XVI, 510 S. In der Reihe: Frontiers in Chemistry. Verlag W. A. Benjamin, Inc., New York, 1963. Preis der broschierten Ausgabe \$ 6.95.

Auf engstem Raum läßt der Autor die wichtigsten Ergebnisse seiner Arbeitsgruppe aus den letzten 15 Jahren Revue passieren: Die Präzisionsberechnungen der Energie leichter Atome und kleiner Moleküle (speziell mit Einzentrenfunktionen) durch Konfigurationenentwicklung, als Kern- und Glanzstück die Pariser-Parr-Pople-Theorie der π -Elektronensysteme und als Abschluß die Theorie der separierten Elektronenpaare. Dazwischen finden sich eine Menge kurzer Hinweise auf neuere und neueste Arbeiten über freie Moleküle, ein knapper Abschnitt über die Methoden der Atome im Molekül und, als besondere Delikatesse, am Schluß ein Hinweis auf die Arbeiten SINANOGLUS zur Mehrelektronentheorie.

Das Hauptgewicht liegt auf der Berechnung von Energien, während andere Eigenschaften der Systeme, etwa die Symmetrie, kaum betrachtet werden.

Die 125 Seiten Text werden durch 32 Originalarbeiten, davon 14 aus dem Arbeitskreis des Autors, ergänzt. Neben etwa 20 Arbeiten über π -Elektronensysteme findet man u. a. mathematische Probleme der Bestimmung von Moleküleigenschaften (BOYS und COOK 1960) und Dichtematrizen (MCWEENY 1959). Die über 400 Literaturzitate weisen auf vorzüglich englisch geschriebene Arbeiten hin.

Text und Formeln sind klar gesetzt, Druckfehler selten.

Das π -Elektronenkapitel und die zugehörigen Originalarbeiten sind so klar und ausführlich gehalten, daß man nach ihrem Studium die P-P-P-Methode anwenden kann, auch wenn man ihre Voraussetzungen und ihren Zusammenhang mit exakteren Verfahren nicht im einzelnen kennt.

Die übrigen Gebiete werden dahingegen so knapp behandelt, daß ohne Rückgriff auf die Originalliteratur und ausführlichere Darstellungen kein tieferes Verständnis möglich ist.

Vieles läßt der Autor bewußt fort, so relativistische Effekte, natürliche Orbitale, statistische Methode, Ligandenfeldtheorie. Ein Sachregister fehlt, das Autorenregister ist unzuweckmäßig indiziert (nur Textseiten, keine Literaturzitate).

Bei dieser Anlage des Buches sind natürlich Flüchtigkeiten und unpräzise Ausdrücke einerseits, Wiederholungen andererseits unvermeidlich. So ist das Kapitel 2, Problemstellung, viel zu kurz und wäre besser durch Hinweise auf einzelne Lehrbuchabschnitte ersetzt worden.

In Kapitel 18 über die Theorie der Elektronenpaare sind die Seiten 109 bis 114 überflüssig, da ihr Inhalt ausführlicher und klarer in den abgedruckten Arbeiten von PARKS und PARR (1958) sowie ALLEN und SHULL (1961) steht. Der Sonderdruck PARISER (1953) auf Seite 240 ist entbehrlich, da in PARISER und PARR (1953, II), auf Seite 248/249, eingearbeitet.

Ob Sammlungen von Originalarbeiten überhaupt in Buchform erscheinen sollten, ist bei der anschwellenden Publikationsflut in jedem Fall sehr kritisch zu prüfen. Gerechtfertigt wäre ein solcher Nachdruck meines Erachtens nur dann, wenn damit 1. ein fest umrissenes Spezialgebiet selbstkonsistent und ohne größere Wiederholungen dargestellt werden kann und 2. die Originalarbeiten schwer zugänglich sind. Bei Berücksichtigung dieser Kriterien könnte der Band wesentlich dünner sein.

Eine Quantentheorie der Elektronen in Molekülen, wie der Titel sagt, ist das Buch also nicht. Dafür gibt es ein lebendiges Bild einiger moderner Entwicklungslinien und macht mit zündendem Optimismus dem Leser Lust, sich selber an die Front der theoretischen Chemie zu stellen.

HEINRICH V. HIRSCHHAUSEN

(Eingegangen am 7. Juni 1964)