

## Recensiones

**E. A. Moelwyn-Hughes: Physikalische Chemie.** Bearbeitete Übersetzung von W. Jaenicke, H. Göhr. Unter besonderer Mitwirkung von H.-D. Sabel. Stuttgart: G. Thieme 1970. XXIV, 714 S., 269 Abb., 309 Tab., DM 59,80.

Der Autor, der ab 1945 in Cambridge etwa 1000 Studenten in physikalischer Chemie ausgebildet hat, braucht auch auf dem Kontinent nicht vorgestellt zu werden. Der konsequente Aufbau aus atomistischen Grundexperimenten, Statistik und Quantentheorie machte die "Physical Chemistry" ebenso berühmt wie der hohe Anspruch "The complete physical chemist blows his own apparatus and solves his own equations".

Die durch Zwischenüberschriften in etwa eine Seite lange Lernabschnitte unterteilten 23 Kapitel der deutschen Ausgabe behandeln

1. Experimentelle Grundlagen und 2. Mathematische Formulierung der kinetischen Gastheorie.
3. Experimentelle Grundlagen und 4. Mathematische Formulierung der Quantentheorie,
5. Grundbeziehungen der chemischen Thermodynamik,
6. Zwischenmolekulare Energie, 7. Zustandssummen,
8. Einatomige (Lichtdispersion), 9. Zweiatomige (Lichtabsorption), 10. Dreiatomige (Raman-Effekt) und 11. Vielatomige Moleküle (Röntgen- und Elektronenstreuung),
12. Kristall-, 13. Gas-, 14. Metall- und 15. Flüssigkeitszustand,
16. Lösungen, 17. Ionen, 18. Grenzflächenerscheinungen,
19. Chemische Gleichgewichte in homogenen und 20. Gleichgewichte in heterogenen Systemen,
21. Kinetik homogener Reaktionen in Gasen und 22. heterogener und photochemischer Reaktionen,
23. Reaktionskinetik in Lösungen.

Im Anhang stehen neben Ableitungen, die für den laufenden Text zu umfangreich wären, einige Integrale und Reihenentwicklungen.

Heute ist das Buch leider weitgehend veraltet. Die Masse der verarbeiteten Originalliteratur stammt aus den 30er Jahren. Die letzte Revision durch den Autor erfolgte in den Jahren 1960/61, und die deutschen Bearbeiter konnten neben dem Riesenwerk des Übersetzens (der Text entspricht etwa  $\frac{2}{3}$  des Euckenschen Lehrbuches der Chemischen Physik) nur an wenigen Stellen auf Lehrbücher und Monographien aus den 60er Jahren hinweisen.

Ein Beispiel (Kap. 9.8, Anfang): „Mit Ausnahme des Wasserstoffs<sup>4</sup> und der Halogenwasserstoffe<sup>5</sup> gibt es keine befriedigenden theoretischen Ausdrücke, die die potentielle Energie zweiatomiger Moleküle in einem gegebenen Elektronenzustand als Funktion des Kernabstandes  $r$  beschreiben“ (Zitate von 1930 bzw. 1932). Vergleiche dazu Schwarz, Theoret. chim. Acta (Berl.) **15**, 235 (1969).

Ein zweites Beispiel (Kap. 19.17 Wasserstoffbrücken, Abb. 4 und S. 555, dimere Ameisensäure): „... die zum Bruch einer einzigen Wasserstoffbrücke in der Gasphase notwendige Energie  $4,38 \text{ kcal/Mol} + 3 RT$ ...“. Der C=O-Abstand von  $1,16 \text{ \AA}$  ist um etwa  $0,05 \text{ \AA}$  zu klein, der O—H...O-Abstand auf  $\pm 0,01 \text{ \AA}$  bekannt. Die Abschätzung für den zweiten Summanden ist viel zu grob (U. Jentschura).

Die Ungenauigkeiten beginnen auf S. IV (second revised edition 1965), die Druckfehler beim ersten Wort auf dem Innendeckel (INTERATIONALE). Im mathematischen Anhang ist S. 694, Tabelle links unten der Faktor 2 zu streichen.

Doch der imponierende Anfang ist gemacht, quasi den „Großen Eucken“ fortzusetzen, und die Leser sind von den Herausgebern zur Korrektur aufgefordert. Der niedrige Preis und der klare, zweispaltige Druck werden sicher dazu beitragen, daß bald eine Neuauflage möglich wird.

H. v. Hirschhausen

Eingegangen am 9. März 1970

**Theory of Intermolecular Forces**, by H. Margenau and N. R. Kestner. London: Pergamon Press 1969.

This book treats a topic for which the need of a modern, comprehensive, up to-date, report was badly felt. The only book in the field which appeared in recent years is Volume 12 of *Advances in Chemical Physics*, edited by J. O. Hirschfelder, in which both the theoretical and experimental developments are reviewed.

Margenau and Kestner's work focuses on basic theory. In the first chapter they give a brief account of the history of molecular forces, from early days up to about 1935.

Chapter 2 deals with long-range forces. After a paragraph on the calculation of the classical potential energy, the quantum theory of long range forces is developed using perturbation theory. The interaction between two hydrogen atoms is calculated first, at different levels of approximation. London's formula is derived, symmetric and asymmetric molecules are considered and results from variational and third-order perturbation theory are also discussed.

In Chapter 3 short range interactions are considered. At small intermolecular distances the two familiar methods of quantum chemistry are of help, that is the Heitler-London and the Molecular Orbital Methods. The theories are adapted for use in calculating intermolecular energies. The subsequent chapters may be of particular interest for the theoretical physicists. Interaction of small atomic systems at intermediate distances, nonadditivity of intermolecular forces with particular emphasis on three-body forces, relativistic effects and interactions between excited atoms are treated in detail.

In a chapter devoted to forces between molecules the most recent results for interactions between hydrogen molecules, a hydrogen molecule and a hydrogen or helium atom are reviewed, together with a discussion of forces between long paraffin chains, or large conjugated molecules. The last chapter is devoted to physical adsorption. Results for atoms adsorbed on insulators or metals both at small or high density of adsorbed atoms are collected.

At the end an interesting post scriptum on current research, problems and trends in the theory of intermolecular forces and an extensive bibliography is added.

The book is outstanding both for the almost complete coverage of recent work in the field and the deepness of treatment.

In my opinion I would not suggest it as a textbook for students in quantum chemistry or advanced physical chemistry, except for very specialized courses, but rather as supplementary reading. However I would recommend it strongly to people from other areas entering the field. Particularly it should be present on the desk of scientists interested in problems related to the packing of molecules in organic crystals and in calculating reaction paths.

M. Simonetta

Received March 5, 1970