

trochemischen Prozessen (Lengyel und Conway), Struktur und Thermodynamik geschmolzener Salze (Papatheodorou).

Leider geben einzelne Aufsätze nur sehr begrenzte Teilaspekte der behandelten Gebiete wieder. So wird im 1. Kapitel die Solvation nahezu ausschließlich als Struktur im Ortsraum verstanden, die Beeinflussung der Lösungsmitteldynamik durch gelöste Stoffe findet kaum Erwähnung. Aber auch innerhalb dieser Begrenzung finden sich schmerzliche Lücken: Da die Monographie auf wäßrige Lösungen beschränkt ist, fehlen so interessante Phänomene wie die selektive Solvation aus Lösungsmittelgemischen mit ihren interessanten Anwendungsmöglichkeiten.

Im zweiten Kapitel bringt Conway eine gut lesbare Diskussion des Debye-Hückel-Modells und seiner Limitationen. Diverse, meist erfolglose Versuche, diese Grenzen prinzipiell zu überschreiten, werden beschrieben. Von den 173 Literaturziten sind nur ganz wenige jünger als zehn Jahre. Es scheint, daß außer K. S. Pitzer niemand Neues zur Thermodynamik von Ionenlösungen beizutragen wußte.

Die Herausgeber der Serie haben es sich etwas zu leicht gemacht, sonst hätten sie wohl verhindert, daß die beiden letzten Abschnitte in Conways Aufsatz das Hauptthema von Kapitel 3 aus der Feder von J.-C. Justice sind. Hier steht das Problem der Entkopplung thermodynamischer und kinetischer Effekte im Vordergrund. Der Autor scheint diese Entkopplung grundsätzlich für möglich zu halten. Von 210 Seiten, die dieser Aufsatz einnimmt, umfaßt der Abschnitt „Recent Developments“ gerade 24 Seiten.

In Kapitel 4 befassen sich Lengyel und Conway im wesentlichen mit den klassischen Theorien der abnormalen Protonenleitfähigkeit in Wasserstoffbrücken-haltigen Systemen.

Im letzten Kapitel faßt Papatheodorou spektroskopische und thermodynamische Untersuchungen an geschmolzenen Salzen zusammen. Das Bild ist unvollständig, da kinetische Größen wie Ionenleitfähigkeiten oder Reibungskoeffizienten nicht mit diskutiert wurden.

Von einem „Comprehensive Treatise“ der thermodynamischen und Transporteigenschaften wäßriger und geschmolzener Elektrolyte darf man mehr erwarten.

K. G. Weil

J. N. Murrell, S. Carter, S. C. Farantos, P. Huxley, and A. J. C. Varandas: *Molecular Potential Energy Functions*, Verlag John Wiley & Sons, Chichester, New York, Brisbane, Toronto, Singapore 1984. 197 Seiten, Preis: £ 19.95.

Der Titel ist zunächst wenig aussagekräftig. Man könnte dahinter leicht ein Kompendium von mehr oder weniger gut berechneten oder gemessenen Potentialflächen einer Reihe von Molekülen vermuten. Eine genauere Durchsicht macht das Buch allerdings sehr attraktiv und recht interessant.

Das erste Kapitel behandelt in kurzer Form die gängigsten Potentialfunktionen in zweiatomigen Molekülen: die Morse-Funktionen für gebundene Moleküle und die Lennard-Jones-Funktionen für van der Waals-artige Systeme. Für spektroskopische Anwendungen wird dann auf die Dunham-Analyse, die RKR-Methode und Erweiterungen wie Hulbert-Hirschfelder- und Extended-Rydberg-Potentiale eingegangen. Damit sind die Grundlagen für Potentiale in mehratomigen Systemen gelegt. Die Darstellung ist kurz, prägnant und anschaulich und erspart das Lesen ausführlicher Literatur.

Das zweite Kapitel ist verhältnismäßig kurz und weist lediglich auf einige Besonderheiten in den Potentialflächen mehratomiger Moleküle hin, welche durch Symmetrieänderung verursacht werden. Anschließend werden quantenmechanische Verfahren zur Berechnung von Potentialflächen diskutiert; neben SCF- und CI-Methoden in Gauß- und Slater-Basisätzen werden auch LEPS-Flächen und die DIM-Methode vorgestellt, und es wird auf die Bedeutung von Zwei- und Drei-Teilchen-Wechselwirkungen hingewiesen. Das Kapitel gibt eine gute Übersicht über derzeit verwendete Verfahren und Hinweise auf einige Übersichtsartikel.

Im weiteren folgt ein Kapitel über Koordinaten zur Beschreibung von Flächen für dynamische Betrachtungen (Reaktionskoordinaten von Marcus, hypersphärische Koordinaten) und spektroskopische

Anwendungen (Symmetrie-Koordinaten, innere Koordinaten). Der allgemeine Teil ist nach den ersten 4 Kapiteln (48 Seiten) im wesentlichen abgeschlossen. Er ist leicht zu lesen und gibt in kurzer Fassung einen guten Einblick in die Probleme bei Potentialflächen; er schafft weiterhin die Grundlage für die verschiedenen nachfolgenden Anwendungen.

Das fünfte Kapitel diskutiert die Beschreibung der langreichweitigen Wechselwirkung in van-der-Waals-Molekülen; es geht auf Zwei- und Drei-Teilchen-Wechselwirkungen ein, auf die Dämpfungsfunktion in der R^{-n} -Entwicklung und gibt Flächen und Parameter für einige dreiatomige Edelgas-HCl- und Edelgas-H₂-Systeme. Es folgen zwei Kapitel, welche eine analytische Beschreibung von Potentialflächen durch Anpassung an berechnete ab initio Punkte einerseits (Beispiel LiFH₂, H₂F und Alkali-Trimere) sowie durch Reihenentwicklung auf der Basis von gemessenen spektroskopischen Daten andererseits (Beispiel HO₂, SO₂, C₃, HCN) vorstellen und dabei auftretende Schwierigkeiten aufzeigen.

Im weiteren Teil werden einzelne, in den letzten Jahren viel untersuchte, Flächen behandelt. Diese Kapitel (8–12) geben auf 80 Seiten einen schönen Überblick über die vielen Versuche zur Bestimmung der Flächen mit den unterschiedlichsten Methoden, geben zahlreiche Höhenliniendiagramme zur Veranschaulichung der Flächen sowie numerische Werte für deren analytische Darstellung. Im einzelnen handelt es sich dabei um H₃, H₂O, O₃, ClO₂, HOF, H₂, HCO, H₂CO, H₂C₂ und H₂O₂. Dabei werden charakteristische allgemeine Merkmale wie mehrfache Minima, vermiedene Kreuzungen, Renner-Teller-Aufspaltungen und Besonderheiten der ionischen Systeme am Beispiel herausgearbeitet. Für die Verwendung einer Potentialfunktion in Form einer Entwicklung nach Vielteilchen-Wechselwirkungen wird sehr plädiert, aber es wird auch konstatiert „we would encourage an open mind on the functional forms used for the many body terms. The best functions may have yet to be found“.

Im Anhang werden schließlich noch recht nützliche Umrechnungsformeln von Potentialtermen in Reaktionskoordinaten (r_1, r_2, α) in die Darstellung in spektroskopischen Koordinaten (R_1, R_2, R_3) für dreiatomige Moleküle sowie einige andere nützliche Koordinatentransformationen gegeben.

Das gesamte Buch von 194 Seiten enthält viel handfeste Information, sowohl was allgemeine Formeln und Vorstellungen angeht als auch was spezielle Beispiele betrifft. Es ist modern und gut zu lesen. Ich kann es mir gut vorstellen als Grundlage für ein Seminar für Diplomanden und Doktoranden in Chemie und Physik; es ist aber auch eine kompakte Monografie, aus welcher Wissenschaftler auf dem Gebiet der theoretischen Reaktionsdynamik oder Spektroskopie rasch Information nachschlagen können, ohne eigens Originalliteratur zu lesen, oder um darin Hinweise auf Originalarbeiten zu erhalten. Schließlich ist die im Schluß erwähnte Anregung zur Erstellung und Nutzung einer Datenbank von Potentialdaten überdenkenswert. Insgesamt finde ich das Buch sehr empfehlenswert.

S. Peyerimhoff

G. J. Long: *Mössbauer Spectroscopy Applied to Inorganic Chemistry*, Vol. 1 aus der Reihe: *Modern Inorganic Chemistry*, Plenum Publishing Corporation, New York und London 1984. 667 Seiten, Preis: US \$ 92.50.

Der Anfang ist schlimm: „The Mössbauer effect, or the recoilless emission and resonant absorption by the nucleus of a γ ray, was foreseen in papers by Lamb¹ in 1939 and Dicke² in 1953 ...“

Das ist eine Verfälschung der geschichtlichen Tatsachen, und gravierend ist, daß hier die eigentliche Entdeckung Mössbauers und sogar der Titel des Buches in Frage gestellt wird. Die rückstoßfreie Gamma-Resonanz-Absorption war nicht vorhergesehen, auch nicht in einem Gedankenexperiment eines Theoretikers. Wenn man das behauptet, so könnte man ebenso gut auch Heisenberg zum Entdecker machen, denn die Mössbauer-Linie wird durch seine Unschärferelation bestimmt. Auf diese Weise darf man Mössbauer nichts wegnehmen. Der schönste Aspekt – wie es nämlich zu der großartigen Entdeckung kam – wird durch die falsche Darstellung