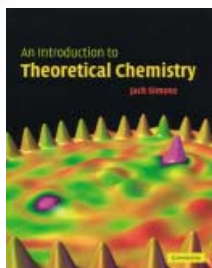




### An Introduction to Theoretical Chemistry



Von Jack Simons.  
Cambridge University Press,  
Cambridge 2003.  
461 S., geb.,  
29.95 £.—ISBN  
0-521-53047-4

Bei einer Einführung in die Theoretische Chemie stellt sich die Frage, in welchem Verhältnis Ergebnisse präsentiert und hergeleitet werden sollen. Der Autor hat in seinem Lehrbuch eine recht unorthodoxe Aufteilung gewählt. Im Vorwort lässt Simons keinen Zweifel aufkommen, dass er ein Lehrbuch geschrieben hat, das eine große Bandbreite an Theorie dem Leser nahebringen soll. Dies spiegelt sich auch im Inhaltsverzeichnis wider.

Das Buch ist in zwei Teile gegliedert. Im ersten behandelt Simons „Hintergrundmaterial“, wobei er vornehmlich Standardbeispiele und -ergebnisse der Quantenmechanik anspricht. Der zweite Teil umfasst vier Kapitel, in denen der Autor zunächst die Verbindung zum Experiment herstellt und dann, interessanterweise zusätzlich zu einer weiteren Vertiefung quantenmechanischer Methoden, statistische Thermodynamik und Kinetik diskutiert.

Nach einer kurzen Einführung wird im ersten Teil die Schrödinger-Gleichung postuliert. Mit ihr werden im Folgenden das „Teilchen im Kasten“ und wasserstoffähnliche Atome behandelt. Im Zusammenhang mit Molekülen wird die Born-Oppenheimer-Näherung vorgestellt und die Hückel-Theorie für Polyene erarbeitet. Anschließend wird

auf Rotationen und Vibrationen eingegangen, bevor schließlich Störungs- und Variationstheorie und die Verwendung von Punktsymmetrie erläutert werden.

Der zweite Teil beginnt mit allgemeinen Ausführungen über Bindungslängen, molekulare Strukturen und deren experimentelle Ermittlung. Weiterhin werden die Woodward-Hoffmann-Regeln und die statistische Mechanik vorgestellt. Im folgenden Kapitel wird oberflächlich der Hartree-Fock-Mechanismus dargestellt, wobei auch Basissätze und Molekülorbitale eingeführt werden. Die Mängel des Hartree-Fock-Formalismus leiten zu einer anschaulichen Entwicklung des „Configuration-Interaction“-Ansatzes über. In der Folge werden die Coupled-Cluster-Methode, Störungstheorie, Quantum-Monte-Carlo-Methoden und die  $r_{12}$ -Methode nur kurz erläutert, während unerklärlicherweise die Dichtefunktionaltheorie sehr ausführlich diskutiert und sogar das Hohenberg-Kohn-Theorem bewiesen wird. Da es sich dabei nicht um einen konstruktiven Beweis handelt, ist er für einen angehenden Theoretiker wenig informativ. Das Kapitel wird mit der Erläuterung der Theorie spektroskopischer Methoden zur Ermittlung molekularer Strukturen beendet.

Das vorletzte Kapitel bricht völlig aus dem bisherigen Themenbereich aus und beschäftigt sich ausschließlich mit statistischer Thermodynamik. Hier werden Zustandssummen hergeleitet und die Verwendung von Monte-Carlo-Methoden und Moleküldynamik(MD)-Simulationen zur Bestimmung thermodynamischer Eigenschaften sowie die Thermodynamik von Gasen, Flüssigkeiten und Kristallen erörtert.

Ein weiterer Bruch erfolgt beim Übergang zum letzten Kapitel zum Thema Kinetik, in dem zunächst die Theorie des Übergangszustands erklärt wird. Sehr kurz wird auf MD-Simulationen, RRKM-Theorie und Wellenpaketpropagation eingegangen, zuletzt werden, ebenfalls kurz, Detektionsmechanismen für chemische Reaktionen besprochen.

Insgesamt ist das Buch sehr gut aus dem Inhaltsverzeichnis zu erschließen. Der Autor legt besonderen Wert darauf, dass der Leser nicht durch Hin- und Herbüßern vom Thema abgelenkt wird, weswegen er oftmals zuvor darge-

stellte Ergebnisse wiederholt. Daher eignet sich das Lehrbuch gut dazu, sofort in eine bestimmte Thematik einzusteigen. Besonders der zweite Teil des Buches wirkt allerdings unzusammenhängend.

Leider hat Simons sich dazu entschlossen, die Übungsaufgaben nicht direkt in den Text zu integrieren, sondern sie gebündelt ohne Kapitelreferenz am Ende zu platzieren. Dadurch ist das Buch für den autodidaktischen Unterricht ungeeignet, und auch für einen Kursleiter ist es mühselig, die passenden Aufgaben herauszusuchen. Dafür werden die Lösungen zu den Aufgaben ebenfalls gebündelt im Anschluss an die Problemstellungen geliefert.

Gerade im ersten Teil erschweren lapidar erwähnte Begriffe wie „quantization“, „hermiticity“ und „orbital“ oder der Kommutator „[,]“ das Verständnis. Ebenfalls verwirrend ist die Verwendung von „non-zero“, wenn Größen gemeint sind, deren Wert nicht notwendigerweise null ist.

In der Einführung betont Simons, dass er absichtlich auf Literaturhinweise verzichtet hat. In der Tat erwähnt er lediglich ein paar Literaturstellen im Vorwort und verweist allgemein auf seine Homepage im Internet. Dort ist das komplette Werk im pdf-Format in Farbe zugänglich, während das gedruckte Buch nur in Grautönen daherkommt. An dieser Stelle ist ebenfalls sein weiterführendes Werk *Quantum Mechanics in Chemistry* komplett im pdf-Format erhältlich.

Simons deckt wirklich eine Vielzahl unterschiedlicher Themen ab und betont ausdrücklich die Unterschiede zwischen klassischer Mechanik und Quantenmechanik. Im Text waren leider einige Fehler zu entdecken: Beispielsweise fällt ein Faktor von 2m in der Formel 1.23ff unter den Tisch, der in der Formel 1.22 noch auftaucht, sodass der uneingeweihte Leser schnell verwirrt ist. Dennoch liest sich das Buch flüssig und vermittelt überwiegend eingängig eine enorme Menge Wissen.

B. Christopher Rinderspacher  
Center for Computational Quantum  
Chemistry  
University of Georgia, Athens (USA)

DOI: 10.1002/ange.200385028