



Density Functional Theory

Bevor man eine Reise in ein fremdes Land antritt, ist es ratsam, einen Reiseführer zu lesen. In diesem Sinne könnten Interessierte, die sich in das Reich der Dichtefunktionaltheorie (DFT) begeben wollen, das Buch von D. Sholl und J. Steckel zu Rate ziehen. Die Autoren bieten einen „Reiseführer“ in das Land der Dichtefunktionale und einen kurzen Leitfaden für „Quantenchemie-Touristen“, wie sie es nennen, an. Bis zur Entdeckung durch Kohn und Hohenberg in den 1960er Jahren war die DFT „Terra incognita“. Mehr als 40 Jahre später ist dieses Gebiet eine sprudelnde Quelle von zahlreichen Funktionalen, mit deren Hilfe die Elektronenstrukturen großer, komplexer Systeme mehr oder weniger genau berechnet werden können.

Künftige DFT-Reisende werden sich vermutlich fragen, warum sie gerade dieses Buch kaufen sollen, wenn bereits mehrere andere Leitfaden angeboten werden. Ich betone hier die Bezeichnung „künftige“, weil sich das vorliegende Buch eindeutig an Neulinge und nicht an häufige Besucher des DFT-Lands oder gar Einheimische richtet. Ein Grund für den Kauf ist, dass dieses Buch leicht zu lesen ist und als „Überlebensausrüstung“ den Reisenden genug Selbstvertrauen gibt, ausgestattet mit dem nötigen Grundwissen, eine Reise ins DFT-Land zu wagen. Sehr vorteilhaft an diesem Leitfaden ist, dass er viele praktische Beispiele aus dem Leben im DFT-Land beschreibt und Übungen enthält, deren Bearbeitung die Reise erleichtert. Die Beschreibungen sind aktuell, enthalten auch moderne Entwicklungen wie die Dispersionswechselwirkungen und die Ab-initio-Moleküldynamik, der ein ganzes Kapitel gewidmet ist. Themen wie die Theorie des Übergangszustands und die Schwingungsanalyse, die nicht gerade DFT-spezifisch, aber für jede Elektronenstrukturbeschreibung ziemlich wichtig sind, werden ebenfalls ausführlich erörtert. Ein weiterer Grund, diese Einführung zu kaufen, hängt damit zusammen, dass das DFT-Land in zwei Hauptregionen geteilt ist: in das „Hochland“ mit den hohen Bergen und tiefen Tälern der Moleküle und Komplexe sowie das „Flachland“ mit einer sanfteren, gleichmäßigen Landschaft der periodischen Festkörpersysteme. Ein exzellenter aktueller Reiseführer durch das „Hochland“ ist mit dem Buch von Koch und Holthausen bereits auf dem Markt, aber über das „Flachland“, das in dem vorliegenden Buch schwerpunktmäßig beschrieben wird, sind nur ältere Berichte erhältlich.

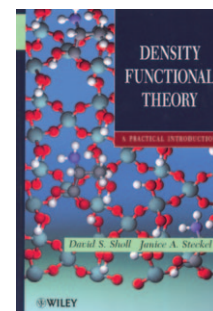
Das einzige größere Problem der vorliegenden DFT-Einführung beruht darauf, dass die Autoren auch grundlegende Informationen über benach-

barte Gebiete wie Hartree-Fock- und andere Methoden, die auf der Wellengleichung beruhen, zu liefern versuchen. Hier begeben sie sich aber in Gebiete, die sie weit weniger erforscht haben als das DFT-Land, und das Ergebnis ist leider etwas enttäuschend. So ist ihre Einführung in die Hartree-Fock-Methode dermaßen auf die DFT-Methodik ausgerichtet, dass die in Abschnitt 1.6 präsentierten Grundgleichungen nicht ganz korrekt sind.

Trotz dieses Kritikpunkts ist das Buch für Studierende und Wissenschaftler, die sich mit der DFT befassen wollen, eine sehr nützliche aktuelle Einführung. Das Gebiet der DFT, und besonders die Anwendung auf Festkörpersysteme, wird ausgezeichnet beschrieben.

Pavel Jungwirth

Institut für Organische Chemie und Biochemie
Akademie der Wissenschaften der Tschechischen Republik, Prag (Tschechische Republik)



Density Functional Theory
A Practical Introduction. Von David Sholl und Janice A. Steckel. John Wiley & Sons, Hoboken 2009. 238 S., geb., 84,90 €.—ISBN 978-0470373170



Chemie der hochenergetischen Materialien

Eine Einführung in die Chemie der hochenergetischen Materialien versprechen Titel und Inhalt des Buchs von Thomas Klapötke. In der Tat ist das Buch eine Art „Missing Link“, seit über 60 Jahren die erste in deutscher Sprache erschienene Monographie und Fachbuch über Chemie und Eigenschaften von Treib- und Explosivstoffen, wenn man von der Enzyklopädie über Explosivstoffe, die von Meyer und Köhler im Fünfjahresrhythmus aufgelegt wird, und den Büchern von H. W. Köhler über Raketentreibstoffe (Giradet Verlag, 1972) absieht.

In 13 Kapiteln stellt das Buch die Grundlagen wie Geschichte, Aufteilung, Unterscheidung und Klassifizierung von explosionsfähigen und explosionsgefährlichen Stoffen, die nach ASTM-Regeln gebräuchliche Bezeichnung „energetischer Stoff“ oder „Material“, sowie die weitere Unterteilung in primäre und sekundäre Explosivstoffe, Treibladungspulver, Raketentreibstoffe und Pyrotechnika dar. Neben den aktuell eingesetzten Stoffen und Verbindungen werden Abbrand, Deflagration und Detonation, Detonationsgeschwindigkeit und -druck, Explosionswärme und Berthelotsches Produkt, spezifische Energie und spezifischer Impuls, charakteristische Geschwindigkeit und Schub als charakteristische Abbrand- und Wirkungsparameter beschrieben. Pyrotechnika für Licht- und Wär-



Chemie der hochenergetischen Materialien
Von Thomas M. Klapötke. De Gruyter Verlag, Berlin 2009. 187 S., Broschur, 49,95 €.—ISBN 978-3110207453

meerzeugung, Nebelerzeugung oder Strahlungsemission von Flare-Sätzen für infrarote Scheinziele und „Decoys“ sind zum Teil ausführlicher dargestellt. In Bezug zur Anwendung wird vor allem die Empfindlichkeit und Toxizität der energetischen Materialien beschrieben und deren Verbesserung als Zielrichtung für neue Entwicklungen gebührend vertreten.

Ein großes Kapitel über Thermodynamik fasst die wichtigsten Leistungsparameter der energetischen Reaktion und ihre Berechnung über thermodynamische Datenbanken zusammen. Die Tests auf chemische Stabilität, Empfindlichkeit und Verwundbarkeit energetischer Materialien werden ebenso berücksichtigt, wie die Wirkungsweise von Hohlladungen und die Methoden zur Messung der Detonationsgeschwindigkeit.

Das Buch wäre nicht von Professor Klapötke, wenn es nicht auch zukunftsweisende Kapitel über das Design energetischer Materialien enthielte. Stickstoffreiche Verbindungen, Tetrazole, Tetrazine, Trinitroethyl- und Polystickstoffverbindungen werden in Bezug auf thermodynamische Vorteile, Synthesen, Eigenschaften und mögliche Anwendungen beschrieben, und im Anhang finden sich als Ergänzung zwei Tabellen über Bildungsenthalpien und Molvolumina. Drei kleinere Kapitel über den sicheren Umgang und die wichtigsten Synthesetypen energetischer Stoffe, verbunden mit einer Liste im Anhang, und verwandte Themen, darunter „Fuel Air Explosives“ und thermobare Waffen schließen den textlichen Teil des Buchs ab. Eine umfangreiche und hoch aktuelle Literaturliste, die

wichtigsten Fachausdrücke und Abkürzungen in deutscher und englischer Sprache sind eine wertvolle Ergänzung.

Professor Klapötke hat ein Kompendium vorgelegt, das in kurz gefasster, leicht zu lesender und verständlicher Form einen Überblick über das Spektrum der Explosivstoffe und energetischen Materialien vermittelt. Das Buch kann junge Studenten und interessierte Laien in kurzer Zeit in das Fachgebiet einführen. Der Fachmann wird gerade in den ersten Kapiteln Ungenauigkeiten in der Beschreibung technischer Eigenschaften finden und eventuell ein Kapitel über Zusammensetzung, Verarbeitung und physikalische Eigenschaften moderner kunststoffgebundener Sprengstoffe und Treibmittel vermissen. Er wird entschädigt durch die Kapitel über zukünftige Entwicklungen und Ziele energetischer Materialien, z.B. die Beschreibung neuer stickstoffreicher Verbindungen.

Der heutigen Zeit angepasst, stellt das Buch auf 186 Seiten eine kurze und gelungene Einführung in das Gebiet der Treib- und Explosivstoffe dar. Es dürfte für interessierte Laien, junge Chemiker und Ingenieure ebenso wie für Fachleute eine interessante Bereicherung des Literatur- und Wissensspektrums darstellen.

Klaus Menke

Fraunhofer-Institut für Chemische Technologie, ICT
(Pfinztal)

DOI: 10.1002/ange.200906186