



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)

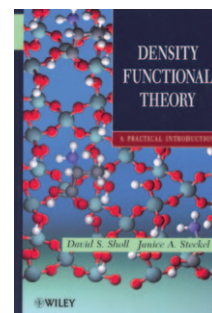
DOI: 10.1002/ange.200905551



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-



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