



Orbital Approach to the Electronic Structure of Solids

Mindestens 90% der Materialien, die für uns Menschen im täglichen Gebrauch nützlich sind, sind Feststoffe. Deshalb gehört es zu den vorrangigen Aufgaben der modernen Festkörperforschung, die theoretischen Grundlagen der wichtigsten Eigenschaften fester Stoffe zu erleuchten, Modelle zu entwickeln und das Verhalten von noch nicht synthetisierten Feststoffen vorauszusagen oder zumindest zu erklären. Eine stille Revolution fand in diesem Forschungsgebiet statt, als immer leistungsfähigere Computer zur Verfügung standen. In den 1980er Jahren ermöglichte *Gaussian*, ein Computerprogramm für Ab-initio-Rechnungen mit isolierten Molekülen, die umfangreiche Anwendung quantenmechanischer Methoden in den Berechnungen molekularer Systeme. Die mittlerweile für die Berechnung von Eigenschaften organischer und anorganischer Feststoffe vorhandenen, in der Regel auf der Dichtefunktionaltheorie basierenden Codes sind verwendet worden, um die Eigenschaften von Millionen von Materialien zu modellieren. Angesichts der Vereinfachungen und Annahmen in der zugrundeliegenden Theorie wurde dabei oft eine erstaunliche Genauigkeit erzielt. Sogar unerfahrene Chemiker können heute Materialien theoretisch analysieren, modellieren und deren Eigenschaften vorhersagen. Aber verstehen sie auch die Grundlagen? Chemiker und Materialwissenschaftler nutzen Computerprogramme, die von Physikern erstellt wurden. Für sie sind diese Programme, wie auch im Fall von *Gaussian*, Blackboxes, die auf irgendeine Weise Ergebnisse liefern. Das Verständnis des wichtigen Konzepts der Bandstrukturtheorie des reziproken Raums bereitet Chemikern, die mit ihren atomaren Spielzeugen ja im realen Raum spielen, mit die größten Schwierigkeiten. Die Komplexität der Bandstrukturen der meisten realen Materialien spiegelt sich in dem Gewirr von Bändern, die sich fast unberechenbar wie Spaghetti zwischen verschiedenen k -Punkten erstrecken, wieder. Wer hat die Geduld, ein Spaghettigericht zu sich zu nehmen, indem er ein Spaghetto nach dem anderen isst?

Das vorliegende Buch hilft dabei, das Mahl zu genießen. Mit ähnlich ausgezeichneten didaktischen Fähigkeiten ausgestattet wie R. Hoffmann, J. Goodenough, J. K. Burdett, M.-H. Whangbo und andere erklären die Autoren geduldig die Band-

strukturen von Feststoffen und ihre Nützlichkeit, indem sie auf ihre Darstellung im realen Raum, die Kristallorbitale, näher eingehen. Die dabei verwendeten theoretischen Konzepte, nämlich die Molekülorbitaltheorie (MO-Theorie) und die erweiterte Hückel-Theorie, gehören zu der Grundausbildung junger Chemiker. Die MO-Theorie ist auf molekularer Ebene ziemlich verständlich und wird deshalb zur ein-, zwei- und dreidimensionalen Beschreibung von Kristallmodellen verwendet. Das Verständnis wird langsam aufgebaut. Oft werden komplexe Systeme zunächst in molekulare Fragmente oder funktionelle Gruppen zerlegt. Anschließend wird erläutert, wie ihre symmetrieadaptierten Orbitale miteinander wechselwirken. Wer sich mit der Darstellung von Atom- und Molekülorbitalen auskennt, hat einen Vorteil: Er erkennt schnell die Zusammenhänge und kann in kurzer Zeit das Verhalten eines chemischen Systems abschätzen.

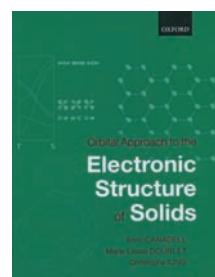
Die Autoren haben nach der Devise „Eine gute Abbildung kann mehrere Seiten Text ersetzen“ gehandelt. Ihr Buch enthält viele anschauliche Abbildungen, typischerweise zwei pro Seite, und mehrere lehrreiche Übungen am Ende jedes Kapitels.

Das Buch ist ein Beispiel qualitativen Denkens im Zeitalter der quantenchemischen Rechnungen. Meines Erachtens hätten Beschreibungen semi-quantitativer Analysen, z.B. der Analyse der Beziehung zwischen partiellen Zustandsdichten eines Systems und den Elektronegativitäten der beteiligten Elemente, die Qualität des Buchs noch gesteigert. Darstellungen der Bandendispersion entlang verschiedener Richtungen im k -Raum in Bezug auf Wechselwirkungen zwischen den Elementarzellen in verschiedenen Richtungen wären ebenfalls sehr nützlich gewesen. Ferner könnten einige Leser einwenden, dass die „Crystal-Orbital-Overlap-Population“-Methode nicht angemessen behandelt wird und ein Vergleich der Bandstrukturen mit den Zustandsdichten verwandter Systeme sehr aufschlussreich gewesen wäre. Diese Kritiken könnten in der nächsten Ausgabe berücksichtigt werden. Die aktuelle Ausgabe ist dennoch ein großartiges Werk, ein didaktisch wertvolles Buch. Die Hochschullehrer sollten die Studierenden fragen, ob sie dieses „Spaghettigericht“ genossen haben. Sie werden mit Sicherheit eine positive Antwort erhalten.

Wojciech Grochala

Faculty of Chemistry and Centre for New Technologies
Universität Warschau (Polen)

DOI: 10.1002/ange.201203709



Orbital Approach to the
Electronic Structure of Solids
Von Enric Canadell, Marie-Liesse Doublet und Christophe Jung. Oxford University Press, Oxford 2012. 364 S., geb., 45,00 £.—ISBN 978-0199534937