

Book Reviews

L. Papula: Mathematik für Chemiker. Ein Lehrbuch für Studenten der Chemie und anderer naturwissenschaftlicher Fachrichtungen. Stuttgart: Ferdinand Enke Verlag 1975. 342 Seiten, 103 Abbildungen, 3 Tabellen, Preis 24.00 DM.

Das Lehrbuch "Mathematik für Chemiker" von Lothar Papula unterscheidet sich in seinem Aufbau grundsätzlich von den meisten im Handel befindlichen Lehrbüchern dieser Art. Während in den herkömmlichen Darstellungen einfache Funktionen, Differential-, Integralrechnung und Differentialgleichungen im Vordergrund der Betrachtungen stehen, gliedert sich der Inhalt des vorliegenden Buches in zwei Teile, wobei im ersten Teil die Methoden der Algebra behandelt werden und erst der zweite Teil der Analysis gewidmet ist. In dieser Stoffauswahl dokumentiert sich der Wandel in den Anforderungen an die Mathematikkenntnisse eines Chemikers. Während zu den Zeiten, da Thermodynamik und Kinetik alleinige Grundlage der theoretischen Ausbildung der Chemiker darstellten, naturgemäß Differential- und Integralrechnung sowie einfache Differentialgleichungen Schwerpunkte des mathematischen Unterrichts für Chemiker bildeten, hat das Eindringen der Theoretischen Chemie in den Studienplan der Universitäten eine wesentliche Erweiterung des Stoffes erforderlich gemacht. Dieser Tendenz hat der Autor in dankenswerter Weise Rechnung getragen.

Das vorliegende Mathematikbuch beginnt mit einigen Grundbegriffen der Mengenlehre (1. Kapitel). Das 2. Kapitel ist den Symmetriegruppen gewidmet und bildet somit die Grundlage für die immer wichtiger werdende gruppentheoretische Behandlung chemischer Probleme. An Hand zahlreicher Moleküle werden die verschiedenen Symmetrieelemente und Symmetrieeoperationen erläutert und die Symmetriegruppen der Moleküle bestimmt. Einen kurzen Überblick über die Elemente der Kombinatorik liefert Kapitel 3, während sich Kapitel 4 mit den algebraischen Eigenschaften von Polynomen beschäftigt. Im Kapitel "Vektoralgebra" (Kapitel 5) werden zunächst die Begriffe "Raum" und "Vektor" an Hand des 3-dimensionalen Anschauungsraumes eingeführt und sodann auf n -dimensionale affine Räume erweitert. Anschließend wird die Metrik des Euklidischen Raumes diskutiert. In diesem Abschnitt findet man auch die Erklärung so wichtiger Begriffe wie "skalares Produkt", "orthonormale Basis" oder "Vektorprodukt im 3-dimensionalen Euklidischen Raum". Besondere Aufmerksamkeit widmet der Autor den Elementen der linearen Algebra (Kapitel 6), wobei zunächst die Regeln für das Rechnen mit Matrizen besprochen werden, gefolgt von der Theorie der Determinanten. Die Determinantentheorie wird zur Bestimmung der linearen Unabhängigkeit von Vektoren sowie zur Lösung linearer Gleichungssysteme herangezogen. Die Eigenschaften einer linearen Transformation sowie die Darstellung einer linearen Transformation durch eine Matrix werden behandelt, ebenso das für die Quantenchemie besonders wichtige Matrixeigenwertproblem.

Im 2. Abschnitt des Lehrbuches, der der Analysis gewidmet ist, beginnt der Autor im Kapitel 7 ("Funktionen einer Veränderlichen") zunächst mit der Erläuterung des Begriffes "Funktion". Stetigkeit und Differenzierbarkeit einer Funktion werden untersucht und die wichtigsten Differentiationsregeln angegeben. Die Integration von Funktionen sowie die Entwicklung von Funktionen in Potenzreihen werden behandelt. Kapitel 8 ist den Funktionen mit mehreren Variablen gewidmet. Hier werden die für die Thermodynamik so wichtigen Begriffe des totalen Differentials und der Zustandsfunktion behandelt. Die Integration von Funktionen mit mehreren Variablen, deren Taylor-Entwicklung und Maxima-Minima-Probleme bilden die weiteren Inhalte dieses Kapitels. Das letzte Kapitel (Kapitel 9) ist der Behandlung gewöhnlicher Differentialgleichungen vorbehalten. Lösungsverfahren für gewöhnliche Differentialgleichungen 1. Ordnung und gewöhnliche lineare Differentialgleichungen höherer Ordnung werden beschrieben. Die Behandlung von Systemen linearer Differentialgleichungen 1. und 2. Ordnung mit konstanten Koeffizienten wird an Hand des Beispiels von zwei miteinander gekoppelten harmonischen Oszillatoren erläutert. Den Abschluß des Buches bildet eine kurze Betrachtung des Eigenwertproblems einer Differentialgleichung, das für die Quantenmechanik von grundlegender Bedeutung ist. Zur Diskussion des Sachverhalts wird das Beispiel eines Teilchens im ein-dimensionalen Potentialkasten herangezogen.

Das vorliegende Lehrbuch ist überaus verständlich geschrieben und zeichnet sich durch eine klare und didaktisch sehr geschickte Darstellung aus. Definitionen und allgemeine Sätze sind im Schriftbild deutlich hervorgehoben; unmittelbar anschließende Beispiele erläutern den allgemeinen Sachverhalt. Für die Lektüre des Lehrbuches sind nur geringe mathematische Vorkenntnisse erforderlich, so daß es sich aus den angeführten Gründen in hervorragendem Maße zum Selbststudium eignet. Man mag das eine oder andere für den Chemiker interessante Thema, wie z.B. Ausgleichsrechnung oder partielle Differentialgleichungen vermissen; man muß jedoch bedenken, daß es sich um ein Taschenbuch handelt, dessen Umfang nicht unbeschränkt erweitert werden kann. Eine Vermehrung der Zahl der Beispiele aus dem Bereich der Chemie vor allem in den Kapiteln 8 und 9 könnte allerdings erwogen werden.

Zusammenfassend kann festgestellt werden, daß es sich um ein ausgezeichnetes Lehrbuch der Mathematik für Chemiker handelt, das den modernen Entwicklungen in der Chemie Rechnung trägt. Aber nicht nur der Chemiker wird mit Nutzen nach diesem Taschenbuch greifen, sondern auch der Kristallograph, der Mineraloge oder andere Naturwissenschaftler.

A. Neckel

Eingegangen am 7. Januar 1976