

Recensiones

Einführung in die Quantenmechanik und ihre Anwendungen. P. Gombás und D. Kisdi. 252 S. Wien-New York: Springer 1970. 49,- DM.

Es hat nicht nur die Flut der wissenschaftlichen Publikationen in Zeitschriften ein beängstigendes Maß angenommen, das gleiche gilt inzwischen auch für Lehrbücher und Einführungen in die Grundfächer wie eine ganze Reihe von Spezialgebieten. So wird es für Studenten und Lehrer immer schwieriger, aus der Unzahl des angebotenen Lehrmaterials das geeignetste herauszufinden. Es sollten daher in den genannten Bereichen besonders strenge Maßstäbe nicht nur an Richtigkeit und inhaltlichen Aufbau, sondern auch an Didaktik und eine abgerundete Darstellung des Stoffes wie die Ausstattung des Buches gelegt werden.

Diese Bemerkungen treffen u.a. auch auf das Gebiet zu, das im obigen Titel bezeichnet ist. Es handelt sich bei dem Werk um die durchaus gelungene Übersetzung des ungarischen Originals aus dem Jahre 1967 ins Deutsche, die einer der beiden Autoren (P. G.) jetzt vorlegt.

Der erste Teil des Buches führt an die Quantenmechanik heran, wobei zunächst die experimentellen Grundlagen qualitativ diskutiert werden. Im Anschluß daran werden die Bohrsche Atomtheorie, ihre Ergebnisse und Grenzen eingehend besprochen, um dann die Grundregeln der Quantenmechanik (im wesentlichen die Schrödingergleichung) induktiv zu erarbeiten. An theoretischem Rüstzeug werden dabei nur die Anfangsgründe von Infinitesimalrechnung, Algebra und Mechanik vorausgesetzt.

Der zweite Teil gibt eine Einführung in die quantenmechanischen Rechenmethoden. Zunächst werden verschiedene Einteilchenprobleme exakt gelöst, u.a. gebundene Zustände und Streuphänomene bei verschiedenen Potentialen berechnet. Sodann werden einige Näherungsverfahren (Störtheorie, Variationsmethode, Bornsche Näherung) abgeleitet und ihre Anwendung an einigen einfachen Beispielen aus der Quantenchemie exemplifiziert.

Der Aufbau des Buches bleibt somit durchaus im konventionellen Rahmen. Positiv hervorzuheben am ersten Teil ist die anschauliche und ausführliche Heranführung an die Quantentheorie, die nicht durch eine Überbetonung des Formalen erschwert wird. Allerdings wird der anzusprechende Leserkreis – Studenten, die ihre Einführungskurse in Physik, Chemie und Physikalische Chemie absolviert haben – mit einem Teil des gebotenen Stoffes schon vertraut sein, zumal die gebrachten Diskussionen nicht tiefer in die physikalische und begriffliche Problematik eindringen, als dies in den Grundvorlesungen vielfach üblich ist.

Der eigentliche Wert des Buches dürfte daher eher im umfangreicheren zweiten Teil liegen, in dem sehr ausführlich an einer Reihe von Modellbeispielen die Anwendung der im ersten Teil bearbeiteten Theorie vorgeführt wird – wobei die physikalische Bedeutung der Ergebnisse allerdings nur kurz besprochen wird. Das Buch ist daher als *Arbeitsgrundlage für Kurse in praktischer Quantentheorie* ausgezeichnet geeignet. Es kann Kursleitern und allen den Studenten empfohlen werden, bei denen sich die Beschäftigung mit der Theorie nicht im Selbstzweck erschöpfen soll, sondern die sich ein besseres Verständnis in theoretischer Chemie und Stoff-Physik erwerben oder sich in diese Gebiete einarbeiten wollen.

Der Rezensent möchte der Auffassung der Autoren beipflichten, daß „die ‚wahre‘ und ‚moderne‘ theoretische Physik *nicht* nur diejenige Forschungsarbeit sei, mit der sich Resultate ohne Rechenarbeit erzielen lassen“, und er glaubt, daß das vorliegende Buch einen gelungenen Versuch darstellt, eine junge Generation von Physikern und besonders Chemikern für die theoretische Lösung „konkreter Probleme“ zu interessieren und vorzubereiten. Dem gerade in dieser Richtung veranlagten Studenten kommt das Buch dadurch entgegen, daß die begrifflichen Schwierigkeiten nicht höher als nötig gehalten und die Probleme mit den durchweg geläufigen mathematischen Hilfsmitteln sauber und verständlich durchgerechnet werden.

Schließlich sei als Vorzug des Buches noch die Sorgfalt von Autoren und Verlag bei Druck und Ausstattung erwähnt, aber auch der für ein „Praktikumbuch für Studenten“ etwas hohe Preis. So sollten ein bis zwei Exemplare wenigstens in keiner Institutsbibliothek fehlen.

Eugen Schwarz

Eingegangen am 8. Mai 1970

The Molecular Orbital Theory of Organic Chemistry. Michael J. S. Dewar. New York: McGraw-Hill 1969. XIV+484 pp., Figs. and Tables, 15×23.5 cm. \$ 16.50.

As the author states in the preface, "...Twenty years ago practicing organic chemists could get by with a smattering of resonance theory, and ten years ago with a rudimentary knowledge of the Hückel method; now, however, any organic chemist who lacks a proper understanding of current developments in MO theory is already heavily handicapped; and unless he takes steps to counter this, he will in a few years time find himself left high and dry by the tide of theoretical organic chemistry and confined to routine studies of a classical nature...", the importance and extent of a great many applications of MO theory in various areas of chemistry are by now well appreciated and well known. During the past forty years the numerous and varied papers published have developed the MO theory into several levels of sophistication. However, most existing books on the MO theory for organic chemists do not go beyond the level of sophistication of ω -technique and few available texts cover the topics up to the PPP method. This is the first book for organic chemists which goes beyond the level of sophistication of the PPP method and includes the most sophisticated ones such as the CNDO, INDO, MINDO, etc.

The author presents the principles of quantum mechanics in the first chapter, assuming that readers have had little prior knowledge of quantum theory. It appears that the treatment would not be intelligible to the average organic chemists except the expert already familiar with its contents. Without discussing the expansion theorem, the concepts of vector space and Hilbert space etc., the author introduces, in a manner likely to confuse unsophisticated readers ket, bra, linear operators, hermitian, complete set, Dirac's delta function etc. For example, on p. 4 after Eq. (1.9), the author states "the operator α must therefore commute with the algebraic number q . This means that α must be a *linear operator*". Actually the reason for requiring that quantum-mechanical operators be linear is principally to assure that the principle of superposition (see Chapter 1 of P.A.M. Dirac's "The Principles of Quantum Mechanics") will hold for various wave functions which satisfy the equations of motion and the boundary conditions for a given system. Commuting with algebraic numbers is just one of the requirements for an operator being linear. On p. 6 the author points out that dynamic operators must be hermitian, however, he fails to show to his unsophisticated readers how the hermitian property guarantees that the expectation values of dynamical quantities will be real. Also on p. 6 line 23, without defining "a complete set", the author states "We shall now show that a linear operator with real eigenvalues and whose eigenfunctions form a complete set is necessarily hermitian; ...". On p. 1 the author claims that "...in this chapter we shall examine the basic principles of this new discipline partly in order to establish the terminology and symbolism that will be used throughout the rest of this book, and partly to familiarize the reader with the philosophy underlying quantum theory. This material is not usually included in the standard texts; ...". However, it appears that Chapter III of Eyring, Walter and Kimball's "Quantum Chemistry", or Chapter 2 of R. B. Leighton's "Principles of Modern Physics" or Chapter V of A. Messiah's "Quantum Mechanics" would serve this purpose better than the first chapter of the present book. Besides these, the bar above the symbol bra is unnecessary, because in Dirac's notation, it is understood that any numbers appearing in the bra are complex conjugates of those appearing in the corresponding ket. There are a few obvious typographical errors such as on p. 5 line 26, $\langle \bar{m} | \alpha | \bar{m} \rangle$ should be $\langle \bar{m} | \alpha | m \rangle$, in the first line of Eq. (1.14), $\langle \bar{m} | \alpha | \bar{m} \rangle$ should also be $\langle \bar{m} | \alpha | m \rangle$ in the fifth line of Eq. (1.14) $\sum_i a_{mi} a_{mi} A_i$ should be $\sum_i \bar{a}_{mi} a_{mi} A_i$, the right side of Eq. (1.82) should be $-\frac{\hbar^2}{2\mu_i} \cdot \frac{\partial^2}{\partial q_i^2}$ instead of $-\frac{\hbar^2}{2\mu_i} \cdot \frac{\partial^2}{\partial q_i}$.

In Chapter 2, exact and approximate solutions of the Schrödinger equation are discussed. The Hartree SCF method, the orbital approximation, the variation method, perturbation theory, the Hartree-Fock method, the Roothaan method, the LCAO approximation, molecular symmetry, etc. are described in 53 pages. It is inevitable that a treatment as concise as this it unlikely to be of more than mnemonic value to beginners.

In Chapter 3, the Mulliken approximations for integrals, charge densities and bond orders, the Goeppert-Mayer-Sklar potential, configuration interaction, the Pople method, the Hückel method and the Pariser-Parr and Ruedenberg methods are briefly described. Physical interpretation of the Roothaan method, attempts to improve the Hückel method and physical significance of bond orders are very well discussed. The Pople method is analyzed in a quite extensive manner.

After the brief quantum mechanical treatments of atoms and simple molecules in Chapter 4, conjugated and aromatic hydrocarbons are studied in Chapter 5. An excellent discussion of the scope and limitations of the semiempirical SCF MO treatment of conjugated hydrocarbons is presented at the end of this chapter. In Chapter 6, the perturbational molecular orbital method and its applications to organic chemistry are treated in great detail. Chapter 7 and 8 give excellent accounts of the SCF MO treatment of open-shell systems, heats of formation, reaction rates and heats of reaction, along with various types of organic reactions. The three-center bond, π complexes, reactions involving π complex intermediates, factors controlling the stability of π complexes, MO calculations for π complexes and miscellaneous criteria of reactivity are also discussed at a sophisticated level. The MO treatment of conjugated systems containing heteroatoms is presented in Chapter 9. Finally, in the last chapter, the newest and the most sophisticated all-valence-electron MO theories are briefly discussed such as the CNDO, NDDO, and INDO methods. The MINDO and PNDO methods and their applications are discussed in detail. In short, to sophisticated readers the last eight chapters of this book are very well written. Throughout the book one can see the author's insights on various problems in the MO theory of organic chemistry. These insights make this book valuable to research workers in this field. However, the inclusion of the "SPO" method in Chapter 5 seems unnecessary, because it has only historical value.

In my opinion, this is definitely an excellent reference book for theoretical (organic) chemists and research chemists with considerable quantum mechanical background. However, I do not believe that its presentation is intelligible to the average organic chemists.

Yuh Kang Pan

Received May 5, 1970