

J. Ladik: Quantenchemie. Stuttgart: Ferdinand Enke 1973. 397 S., DM 29.80.

Dieses aus dem Ungarischen übersetzte Buch ist zweifellos ein Versuch, eine im deutschen Sprachbereich vorhandene Lücke auf dem Gebiete der Quantenchemieliteratur zu füllen. Ob dieser Versuch gelungen ist, läßt sich anhand von Kriterien prüfen. Hierbei ist vor allem zu berücksichtigen, daß Quantenchemie ein dynamisches Gebiet ist, das im Laufe von zehn Jahren sein Gesicht erheblich gewandelt hat. Weiterhin gibt es eine umfassende, sich stetig vergrößernde internationale Literatur auf diesem Gebiet. An diesen Maßstäben gemessen, erscheint es fraglich, ob Ladiks Beitrag einen neuen Standard setzt.

Abgesehen von durch die Übersetzung entstandenen Unklarheiten, kann man dem Autor bescheinigen, daß er mit Sorgfalt an sein Vorhaben herangegangen ist, Quantenchemie neu darzustellen. An vielen Stellen wird deutlich, daß der Autor zweifellos die Kompetenz hat, die Perspektiven auf diesem Gebiet richtig zu sehen — eine Voraussetzung, die manchen jungen amerikanischen Autoren fehlt. Aber es läßt sich schon beim flüchtigen und schließlich mehr noch beim sorgfältigen Lesen nicht übersehen, daß Ladiks Darstellung erhebliche Mängel aufweist, die wir heute nicht mehr leicht nehmen können. Da ist zunächst das Niveau des Buches. Scheinbar repräsentiert es Quantenchemie für einen begrenzten Leserkreis: den Anfänger oder den Spezialisten auf einem anderen Gebiet. An den Anfänger hat Ladik aber doch zu wenig gedacht: das Buch enthält keine Aufgaben und die Aufschlüsselung nach Paragraphen ist nicht präzise genug. Nachdem Dewar vor einigen Jahren einen neuen Standard für Organiker gesetzt hat, fragt man sich, welcher interessierte Spezialist nicht davon Gebrauch machen würde. Einen Vergleich mit Dewar hält dieser Band aber auf keinen Fall aus. Die Betonung des Autors auf solche semiempirische Methoden wie Hückel und PPP, die heute kaum mehr benutzt werden, läßt sich nur didaktisch stützen, führt aber zu falschen Vorstellungen über heutige semiempirische Methoden, die mit Computern beinahe routinemäßig durchgeführt werden können. Auch die *ab-initio* Rechnungen sind nicht beim H_2 oder zweiatomigen Molekülen stehen geblieben, auf die der Autor sehr ausführlich eingeht; hier und da klingt allerdings an, durch Literaturzitate untermauert, daß der Autor sehr wohl mit *ab-initio* Rechnungen vertraut ist.

Wenn wir den Band systematisch durchgehen, so fallen einige Tatsachen unmittelbar auf: Was dargestellt wird, ist sorgfältig diskutiert, aber häufig fehlen entscheidende Punkte. Daß das Kastenpotential und der Tunneleffekt völlig übergangen werden, obwohl von letzterem bei der Wasserstoffbrückenbindung Gebrauch gemacht wird, läßt sich vielleicht noch einsehen; möglicherweise auch, daß der Autor zwar einen höheren mathematischen Standard anvisiert, aber bei den schwierigen Beweispunkten auf andere Bücher verweist. Aber auf keinen Fall kann man den Mangel an Tabellen und Figuren, besonders der letzteren, leicht nehmen. Was zur Erläuterung von Orbitalen und Bindung an Zeichnungen eingeführt wird, ist absolut unzureichend und schematisch. Wenn Linnett schon vor Jahren im Journal of Chemical Education eine dreidimensionale Orbitaldarstellung beschrieben hat und Streitwieser bereits ein ganzes Buch mit Orbital- und Dichtediagrammen publiziert hat, muß der Vergleich für Ladik ungünstig ausfallen.

Um fair zu sein, sollte herausgestellt werden, daß der Autor Hartree-Fock Methode und Korrelationsenergie, Störungstheorie und Variationsrechnung in sehr sauberer Darstellung abhandelt. Auch die Diskussion von größeren Molekülen ist im Rahmen der betrachteten Methoden zuverlässig, insbesondere die Wasserstoffbrückenbildung ist ein origineller Beitrag. Absorption und Emission werden zwar nicht auf Störungsrechnung aufgebaut, sind aber verständlich. Auch die Darstellung der Berechnung von Integralen ist besser als in den meisten vergleichbaren Büchern, wenn sie dort überhaupt diskutiert wird. Die Erläuterung von Hybridisierung ist auch gelungen. Bei hermiteschen Operatoren jedoch läßt die Mathematik sich zweifellos besser darstellen. Die Kommutatorschreibweise wird vermieden, und die Nichtvertauschbarkeit von Operatoren nicht physikalisch erläutert. Auch die physikalischen Einzelheiten des Begriffs Drehimpuls sind nicht zufrieden-

stellend. Schließlich fehlen graphische Darstellungen des Aufbauprinzips und Korrelationsdiagramme.

Zusammenfassend läßt sich leider nur sagen, daß der Band enttäuscht. Dies ist um so bedauerlicher, als der Autor vereinzelt erkennen läßt, daß er durchaus einen modernen Beitrag zur Quantenchemieliteratur hätte leisten können. Der begrenzte Umfang des Buches mag der Grund für den gesteckten Rahmen sein, aber einige oben erwähnte Versäumnisse hätten sich durchaus vermeiden lassen.

Karl Jug

Received July 26, 1974