

Book Review

L. Papula: Übungen und Anwendungen zur Mathematik für Chemiker. Stuttgart: Ferdinand Enke Verlag 1977. 561 Seiten, 90 Abb., 25 Tabellen, Preis: DM 28.80

Bei der Besprechung (vgl. Theoret. Chim. Acta (Berl.) **41**, 187 (1976)) des vom selben Autor verfaßten Lehrbuches "Mathematik für Chemiker" war angeregt worden, die Zahl der anwendungsorientierten Beispiele zu vermehren. Das vorliegende Übungsbuch "Übungen und Anwendungen zur Mathematik für Chemiker" erfüllt diesen Wunsch in reichem Maße. Da das "Übungsbuch" in erster Linie als begleitender und vertiefender Text des "Lehrbuches" konzipiert ist, findet man auch in beiden Werken die gleiche Anordnung der behandelten Themen. Wie schon bei der Rezension des Lehrbuches hervorgehoben worden ist, berücksichtigt die Stoffauswahl vor allem die Bedürfnisse der Theoretischen Chemie. Dieser Gesichtspunkt bedingt, daß abweichend von üblichen Darstellungen, zunächst die Methoden der Algebra besprochen und erst später die Analysis behandelt wird.

Das Übungsbuch kann jedoch auch ohne Lehrbuch mit Gewinn benützt werden, da die für die einzelnen Beispiele aufgezeigten Lösungswege eine hinreichend ausführliche Darstellung der jeweiligen mathematischen Methode beinhalten.

Das vorliegende Mathematikbuch gliedert sich in zwei Teile. Der erste Teil "Übungen zur Mathematik für Chemiker" dient in erster Linie der Überprüfung und Vertiefung der mathematischen Kenntnisse. An Hand von 180 mit allen Zwischenschritten dargestellten und ausführlich kommentierten Übungsbeispielen werden die verschiedenen mathematischen Methoden und Lösungsverfahren erklärt. Zusätzlich zu den eingehend besprochenen Übungsbeispielen werden zur Kontrolle der erworbenen Kenntnisse Übungsaufgaben angegeben, deren Lösungen im Anhang zu finden sind. Naturgemäß überwiegt im ersten Teil des Buches der mathematische Gehalt, dennoch findet man auch hier chemisch und physikalisch relevante Beispiele. Die in diesem Teil behandelten Themen sind: Mengen, Gruppen, Elemente der Kombinatorik, Vektoralgebra, lineare Algebra (lineare Gleichungssysteme, lineare Transformationen, Matrixeigenwertprobleme), Funktionen einer oder mehrerer Veränderlichen (Differentiation, Integration, Extremwerte), gewöhnliche und partielle Differentialgleichungen.

Im zweiten Teil "Anwendungen zur Mathematik für Chemiker" werden 30 ausgewählte und teilweise überaus umfangreiche Anwendungsbeispiele ausführlich besprochen. Die Darstellung überschreitet hier den Rahmen üblicher mathematischer Übungsbücher und nimmt bereits den Charakter eines chemischen oder physikalischen Lehrbuches an, wobei als besonderer Vorteil die eingehende Diskussion der Lösungswege zu werten ist. Eine umfangreiche Tabelle zeigt, welche Verfahren zur Behandlung bestimmter Probleme herangezogen werden und vermittelt auf diese Weise nicht nur einen Eindruck über die vielfältigen mathematischen Hilfsmittel, die zur Bearbeitung chemischer und physikalischer Fragestellungen erforderlich sind, sondern erleichtert auch das Auffinden geeigneter Anwendungsbeispiele für ein bestimmtes mathematisches Verfahren.

Um einen Einblick in die behandelten Themenkreise zu gewähren, seien einige Problemstellungen beispielhaft angeführt. Aus dem Gebiet der Thermodynamik werden die thermodynamischen Zustandsfunktionen, die Zustandsgleichung eines van der Waals'schen Gases und der Carnot'sche Kreisprozeß besprochen. Ausführlich dargestellt wird die Maxwell-Boltzmann Statistik sowie deren Anwendungen auf die Berechnung der Geschwindigkeitsverteilung eines idealen Gases, der mittleren Rotationsenergie eines heteronuklearen zweiatomigen Moleküls sowie der Molwärme einatomiger Festkörper nach dem Einstein- und Debye-Modell. In der Reaktionskinetik findet man neben den üblichen Beispielen die Behandlung der zweistufigen chemischen Reaktion $X \rightarrow Y \rightarrow Z$, die auf ein Matrixeigenwertproblem führt. Die Ermittlung der Normalschwingungen eines linearen Moleküls vom Typ AB_2 wird vorgeführt. Breiten Raum nehmen die Beispiele aus der Quantenmechanik ein. In diesem Kapitel findet man viele Probleme, die üblicherweise in einem einführenden Lehrbuch der

Quantenchemie zu finden sind, wie z.B. das Potentialkastenmodell mit unendlich hohen Wänden, Drehimpulsoperatoren, die Pauli'schen Spinmatrizen, die Behandlung des Wasserstoffatomproblems, des Rotators mit raumfreier Achse und des harmonischen Oszillators, Anwendung der Variations- und Störungsrechnung auf den Grundzustand des Heliumatoms, die Demonstration der LCAO-MO Methode an Hand des H_2^+ -Molekülions sowie die Behandlung des Benzolringes nach der Hückel-MO-Theorie. Hervorzuheben ist, daß bei den besprochenen Anwendungsbeispielen nicht nur der mathematische Lösungsweg dargestellt, sondern auch das jeweilige chemische bzw. physikalische Problem kurz erläutert wird.

Das Übungsbuch ist überaus gut lesbar und verständlich geschrieben. Es zeichnet sich durch eine klare Gliederung und eine übersichtliche Anordnung des Stoffes aus. Problemstellungen und wichtige Begriffe oder Umstände sind im Schriftbild besonders hervorgehoben. Die Lösungsverfahren werden ausführlich erklärt und der Leser wird auf besondere mathematische Schwierigkeiten hingewiesen.

Zusammenfassend kann festgestellt werden, daß es sich um ein ausgezeichnetes anwendungsorientiertes Mathematikbuch handelt. Trotz mathematischer Exaktheit findet die chemische bzw. physikalische Problematik volle Berücksichtigung. Das vorliegende Übungsbuch ist daher nicht nur für Studierende der Chemie, Physik, Kristallographie oder anderer Naturwissenschaften von großem Nutzen, sondern wird auch für die das Fachgebiet "Mathematik für Chemiker" Lehrenden eine gerne in Anspruch genommene Hilfe sein.

A. Neckel, Wien

Received April 4, 1978