

Mathematical Frontiers in Computational Chemical Physics. Ed. by D. G. Truhlar (IMA Volumes in Mathematics and Its Applications, Vol. 15). New York: Springer 1988. 349 pp., 89 figs., DM 68,-.

Das Buch stößt mit einigen „Fronten“ in eine weite Vielfalt der aktuellen Forschung vor. Es beginnt mit einer Einführung (von C. Alden Mead) in die Born-Oppenheimer-Approximation, mittels der das Elektronenproblem bei festgehaltenen Kernen gelöst werden kann, um ein effektives Potential für gegenseitige Kernbewegungen zu erhalten. Weitere Kapitel betreffen entweder direkt dieses Elektronenproblem (von Almlöf, Reinhardt, Langhoff, Paldus und Shavitt) oder die Bewegung der Atome auf der Potentialfläche (von van Güsten, Stillinger, Osborn, Levine und Truhlar et al.). Einige Methoden sind allgemein genug, um für beide Arten von Problemen verwendet zu werden.

Eine „Front“ der physikalischen Chemie ist zweifellos die Spektraltheorie der elektronischen Schrödinger-Operatoren. Zur Berechnung von Wirkungsquerschnitten eröffnen sich zwei Wege: Einmal stehen quasigebundene Zustände (oder Resonanzen) im Mittelpunkt, welche die wichtigsten experimentell gefundenen Strukturen in den Querschnitten verursachen, d.h. man berechnet die Eigenschaften der Zustände direkt. Alternative Ansätze gehen die funktionale Form des Wirkungsquerschnitts insgesamt an, in die dann jeder strukturprägende Zustand implizit eingeht. Beispielrechnungen betreffen das kleine Mehrkörperproblem von zwei Elektronen im H^- , der zehn Elektronen im H_2O oder die isolierte Kollision eines Atoms mit einem Diatom (den „Dauerbrenner“ der theoretischen Chemie).

Hat man es mit sehr großen Systemen zu tun, mit Teilchenzahlen bis zur Avogadro-Zahl, so setzt man Metho-

den der Simulation ein, um kollektive Phänomene im Rahmen entsprechender Potentialenergieflächen zu erfassen. Den Hintergrund bieten hier Verfahren der statistischen Mechanik.

Die letzte „Front“ des Buches sind dynamische und unitäre Gruppen, angewandt auf Probleme der Schwingungsenergie bei sehr großen Amplituden oder bei sehr vielen Basisfunktionen, wo dann Symmetriebetrachtungen wesentliche Rechenvorteile bringen.

Jedes Kapitel enthält einen klar gestalteten mathematischen Formelapparat, der in erklärendes Material eingebettet ist; und die Autoren bieten durchweg die Gewähr, daß die chemisch-physikalische Komponente der Hauptzweck bleibt. Das Buch bietet für theoretische Chemiker einen schönen Überblick über die aktuelle Forschung. Es ist ein Angebot an eine mathematische Leserschaft, sich in die Welt der Moleküle einführen zu lassen.

W. Quapp (Leipzig)