

## Vorwort zur ersten Auflage

Das vorliegende Buch ist aus Vorlesungen entstanden, die ich seit vielen Jahren an der Universität Leipzig für Anfänger und etwas Fortgeschrittene auf dem Gebiet der Theoretischen Chemie halte. Wohl existieren zu diesem Gebiet eine Reihe umfassender Darstellungen, und es gibt eine Vielzahl von Lehrbüchern bzw. Monografien, die sich ausführlich und mehr oder weniger tiefgründig mit speziellen Problemen befassen. Von den Studenten wurde aber immer wieder beklagt, dass kaum eine das einführende Studium begleitende komprimierte und handliche Einführung in die Theoretische Chemie zur Verfügung steht.

Dieses Buch versucht, dem genannten Anspruch gerecht zu werden, zumindest für ein Teilgebiet der Theoretischen Chemie, die Quantentheorie der Moleküle. Es wendet sich an Chemiestudenten mittlerer Semester, unabhängig von ihrer späteren Spezialisierungsrichtung. Auch Publikationen zur Synthesechemie und zur Analytischen Chemie enthalten heute oft Bezüge zur Theorie; ohne Kenntnisse über mikroskopische Moleküleigenschaften ist die moderne „experimentelle“ Fachliteratur kaum und zunehmend weniger zu verstehen. Andererseits sind Teile des Buchs so angelegt, dass sie bei interessierten Studenten Appetit wecken sollen, sich intensiver mit der Thematik zu beschäftigen. Aus diesen beiden Ansprüchen resultiert eine gewisse Inhomogenität im theoretischen Niveau der Darstellung.

...

Die Darstellung enthält nicht mehr, aber auch nicht weniger „Mathematik“ als nach meiner Auffassung für die beabsichtigten Ziele erforderlich ist. Auf Beweise wird im allgemeinen verzichtet. Die mathematische Formulierung der Sachverhalte wird aber nicht umgangen. Darstellungen, die fast gänzlich „ohne Mathematik“ auskommen wollen, führen kaum zu einem tieferen Verständnis der Zusammenhänge. Vom Leser des vorliegenden Buchs wird also erwartet, dass er Formeln nicht überliest, sondern ein Mindestmaß an Bereitschaft zeigt, sich mit ihnen „auseinanderzusetzen“. Vorkenntnisse werden aus der Differenzial- und Integralrechnung sowie im Umgang mit Vektoren, Determinanten und Matrizen benötigt. In weitere mathematische Teildisziplinen (Lösung spezieller Differenzialgleichungen, Umgang mit speziellen Funktionen, lineare Räume und lineare Operatoren, Variationsrechnung, Gruppentheorie) wird der Leser eingeführt.

Übungsaufgaben habe ich nicht aufgenommen. Erfahrungsgemäß werden sie von der Mehrheit der Leser ignoriert. An ihrer Stelle werden Beispiele ausführlicher im Text behandelt.

...

Ich danke dem Verlag B.G. Teubner für die unkomplizierte Zusammenarbeit. Meiner Frau danke ich für ihr Verständnis und ihre Geduld.

Leipzig, im März 1994

J. Reinhold

## Vorwort zur vierten, überarbeiteten und erweiterten Auflage

Die „Quantentheorie der Moleküle“ sollte eine „das einführende Studium begleitende komprimierte und handliche Einführung“ sein. Dieses Ziel wurde offenbar erreicht, denn das Buch ist von Studenten und Kollegen freundlich aufgenommen worden, und auch ein Nachdruck der dritten Auflage ist vergriffen. Eine vergleichbare Darstellung der Thematik in deutscher Sprache ist nicht auf den Markt gekommen. Deshalb erscheint jetzt eine überarbeitete und erweiterte Auflage der „Quantentheorie der Moleküle“.

Das Buch wurde an verschiedenen Stellen überarbeitet und umgeordnet. Neu aufgenommen wurden grundlegende Aspekte der zeitabhängigen Dichtefunktionaltheorie und der ab-initio-Moleküldynamik. Die Behandlung der  $\pi$ -Elektronensysteme und der Allvalenzelektronensysteme wurde gekürzt, so dass sich der Umfang des Buches nicht erhöht hat.

Kapitel 1 umfasst Grundlagen: eine kurze allgemeine Einführung in die Quantentheorie, die Lösung der zeitfreien Schrödinger-Gleichung für einfache Systeme, insbesondere Einelektronenatome, qualitative Aspekte der Theorie der Mehrelektronenatome und das Phänomen der kovalenten chemischen Bindung sowie Modelle und Methoden zu deren Beschreibung. Kapitel 2 führt etwas tiefgründiger in die Quantenmechanik ein und behandelt die grundlegenden Näherungsmethoden; das erfordert eine abstraktere Darstellungsweise. Kapitel 3 umfasst die qualitative MO-Theorie typischer Verbindungsklassen:  $\pi$ -Elektronensysteme, allgemeine Allvalenzelektronensysteme, Koordinationsverbindungen sowie unendlich ausgedehnte Systeme. In Kapitel 4 wird die Theorie der Mehrelektronensysteme ausführlich dargestellt und die quantitative Behandlung solcher Systeme skizziert und kommentiert.

Der beabsichtigten ersten Einführung in das Gebiet entsprechen die Kapitel 1 und 3. Kapitel 2 wird dafür nicht benötigt; es wird für ein vertieftes Studium empfohlen und ist Voraussetzung für Kapitel 4. In Kapitel 3 wird die Darstellungstheorie der Symmetriepunktgruppen extensiv genutzt; eine (unabhängig lesbare) Einführung in diese Thematik ist im Anhang enthalten.

Bei den Literaturempfehlungen, die am Beginn jedes Kapitels auf weiterführende und vertiefende Literatur hinweisen, wurde der Schwerpunkt auf jetzt aktuelle Lehrbücher gelegt. Es wurden aber weiterhin auch empfehlenswerte ältere und insbesondere deutschsprachige Darstellungen aufgenommen, da diese in vielen Universitätsbibliotheken verfügbar sind.

Leipzig, im Juli 2012

J. Reinhold

## Vorwort zur fünften Auflage

In der vorliegenden Auflage wurden einige Verbesserungen angebracht und die bekannt gewordenen Fehler berichtigt.

Leipzig, im März 2015

J. Reinhold



<http://www.springer.com/978-3-658-09409-6>

Quantentheorie der Moleküle

Eine Einführung

Reinhold, J.

2015, XII, 338 S. 119 Abb., Softcover

ISBN: 978-3-658-09409-6