

Theoretische Chemie gleich Quantenchemie?

Zweihundert Jahre Entwicklung der Theoretischen Chemie im deutschsprachigen Raum.

Von Karl Jug. Springer Spektrum, Berlin, Heidelberg, 2015. 295 Seiten, brosch. 29,99 Euro.

ISBN 978-3-662-43364-5

E-Book: 22,99 Euro.

ISBN 978-3-662-43365-2

● Theoretische Chemie – im weitesten Sinne – behandelt Probleme der Chemie mit Mitteln der Mathematik und theoretischen Physik und entwickelt dabei eigene Methoden. Allein bei der üblichen Beschränkung auf Probleme auf molekularer Ebene existiert eine große Vielfalt an Themen aus dem qualitativen wie dem quantitativen Bereich. Die quantitative Seite wird in der Regel im Rahmen der Quantenchemie behandelt, also durch Anwendung der Quantentheorie auf Moleküle.

Auf der Basis seines „Genealogie-Projektes Theoretische Chemie“ versucht der Autor, einen systematischen Überblick über die Entwicklung dieser Wissenschaft zu geben. Den Fortschritt der Ideen und Methoden von den Ursprüngen her beschreibt der Autor einestheils anhand von einzelnen Arbeiten, Querverbindungen und Bemühungen der Betei-

ligten bis heute, andernteils anhand eines Überblicks über Forschungsrichtungen wie semiempirische, ab initio- und Dichtefunktionalmethoden und deren Anwendungen. Dazu kommen Simulationsmethoden und die Quantenreaktionsdynamik. Wer sich für die Entwicklung dieser Fachgebiete mit Schwerpunkt Quantenchemie in Deutschland, Österreich und der Schweiz interessiert, dem sei das Buch empfohlen. Einige Mängel sind jedoch nicht zu übersehen.

Zunächst ist der Buchtitel irreführend. Von theoretischer Chemie kann frühestens ab Ende des 19. Jahrhunderts mit dem Aufkommen der physikalischen Chemie gesprochen werden. „Zweihundert Jahre“ im Buchtitel beziehen sich aber auf lange davor erschienene Bücher, die im Titel „theoretische Chemie“ tragen, aber lediglich der Erfassung des chemischen Wissensstands dienen.

Vor allem aber trägt das Buch der Themenbreite der theoretischen Chemie nicht Rechnung. Dazu trägt bei, dass der Autor, der über semiempirische quantenchemische Verfahren arbeitete, Wissenschaftler subjektiv bewertet. Arbeiten, die ihm randständig erscheinen, beurteilt er negativ. Ihm scheinen ausschließlich die quantitative Richtung der theoretischen Chemie und die Förderung ihrer Entwicklung von maßgeblichem Wert zu sein. Wörter wie „Erfolg“ und „erfolgreich“ kommen im Buch häufig vor, wobei als Erfolg vor allem die Verbesserung von Rechenmethoden zählt. Seine Geringschätzung qualitativer und grundsätzlicher Erkenntnisse kommt immer wieder zum Ausdruck, ob-

wohl sich bereits 1965 sein Doktorvater, Hermann Hartmann, gegen eine Beschränkung der theoretischen Chemie wandte: „Der Chemiker möchte verstehen, warum eine bestimmte Eigenschaft sich beim systematischen Durchgehen einer Stoffklasse in bestimmter Weise ändert“, während für die Quantenchemie „jedes Molekül ... zu einem Spezialproblem“ werde.

Der Leser erhält zusätzlich Informationen über die Zeitschrift *Theoretica Chimica Acta* sowie über Sommerschulen, Symposien, die Arbeitsgemeinschaft und das Informationsblatt für theoretische Chemie. Knapp 1500 Literaturzitate einschließlich Hinweisen auf Wikipedia-Artikel, eine Fundgrube, beschließen das Buch.

Damit liegt ein detailreiches Who is Who der Quantenchemie und verwandter Gebiete im deutschsprachigen Raum, vorwiegend an den Universitäten vor. Wünschenswert bleibt eine weniger subjektiv gefärbte und ihrer Themenbreite angemessenere Geschichte der theoretischen Chemie. Auch wenn diese Wissenschaft an zahlreichen Universitäten auf Quantenchemie und Quantendynamik reduziert wurde – begünstigt durch die Entwicklung der Computer und erfolgreiche Erklärung und Voraussage molekularer Eigenschaften –, so war das Interesse an Vielfalt der Forschung eine Zeit lang wesentlich größer und ist es neuerdings wieder. Nutzung und Weiterentwicklung theoretischer Methoden in der Industrie wären ebenfalls eine Betrachtung wert. Zur Aufklärung chemischer Zusammenhänge mahnte Hans Primas schon 1981: „In exact sciences, every theory has a philosophical, mathematical and empirical content. All these three aspects are equally important; if we neglect one of them, we sooner or later get into difficulties.“

Dietrich Haase, Berlin

Eine ausführliche Fassung der Rezension steht hier:
www.chemie.fu-berlin.de/ag/haase/buchrezension-jug.pdf

