

Vorwort

Man findet in diversen Lehrbüchern, Monographien und Übersichtsartikeln viele gute Darstellungen von Teilgebieten der theoretischen Chemie, seltener aber werden die gemeinsamen Grundlagen und inneren Zusammenhänge der Teilgebiete herausgearbeitet. Da überdies die Terminologie wie auch die Symbolik recht unterschiedlich sind, wird gerade für einen Einsteiger in das Gebiet das Große und Ganze oft nur schwer erkennbar. Als Versuch, die Verknüpfungen deutlich zu machen und die molekularen Aspekte der theoretischen Chemie einigermaßen einheitlich und umfassend darzustellen, habe ich vor rund zwei Jahrzehnten einen dreisemestrigen Kurs konzipiert, der in kompakter Form schrittweise zeigen sollte, wie molekulare Aggregate (Moleküle, Cluster bis hin zu Festkörpern) zusammenhalten, wodurch molekulare Wechselwirkungen und Elementarprozesse zustandekommen und wie sie zu den am Messgerät im Labor zu beobachtenden chemischen Strukturen und Umwandlungen führen. Aus diesem Kurs, der eine Reihe von Jahren an der Universität Potsdam abgehalten und dabei immer wieder überarbeitet wurde, ist das hier vorliegende Buch entstanden.

Ein Buch muss gegenüber einem Vorlesungskurs erweiterten Anforderungen genügen: Es sollte tiefer gehen, Anschlusspunkte für zusätzliche Informationen bieten, eine Erstausrüstung an Instrumentarium für praktische Anwendungen bereitstellen etc., und zwar von alledem ein wenig mehr als aktuell unbedingt nötig erscheint; so sollen auch Hinweise für Vertiefungen, Anwendungen und interdisziplinäre Kontakte gegeben werden. Darum habe ich mich hier bemüht. Ob das Vorhaben insgesamt gelungen ist, muss nun der Leser beurteilen, den ich mir vorstelle als einen neugierigen, engagierten Studenten der Chemie oder einer anderen, benachbarten naturwissenschaftlichen Disziplin, auch als einen Wissenschaftler, der sich postgradual in das Gebiet einarbeiten will. Unter den Interessenten könnten außer Chemikern beispielsweise Biologen sein, Molekülphysiker und Molekülspektroskopiker, oder Astrophysiker, die sich mit molekularen Vorgängen in Kometen oder interstellaren Stäuben befassen.

Vielen verdanke ich Anregungen aus Diskussionen und Gesprächen, auf Tagungen, in Seminaren und am Arbeitsplatz, die letzten Endes auch in dieses Buch Eingang gefunden haben. Da sind vor allen meine alten Fachkollegen und Freunde Prof. Evgeni E. Nikitin (Moskau, heute Haifa) und Prof. Zdeněk Herman (Prag) zu nennen sowie meine langjährigen Mitarbeiter, von denen hier Dr. Christian Zuhrt und Dr. Reinhard Vetter ausdrücklich erwähnt werden müssen, aber auch Doktoranden und Studenten, die mich durch ihre Fragen und Überlegungen dazu veranlasst haben, das eine oder andere Problem deutlicher herauszuarbeiten und Argumente schärfer zu fassen. An einigen Stellen wird das im Buch erkennbar sein. Dass ich damit nicht allen gerecht werden kann, liegt auf der Hand; ich bitte dafür schon im voraus um Nachsicht.

Unter all jenen, die auf meine Entwicklung und meine Arbeit Einfluss gehabt haben, muss ich einen ganz besonders hervorheben: meinen verehrten akademischen Lehrer Prof. Bernhard Kockel (1909-1987), bis 1959 Ordinarius für theoretische Physik in Leipzig (später in Gießen), der den damaligen Physikstudenten neben vielem anderen gezeigt hat, wie die begrifflich schwierige, weitgehend unanschauliche Quantenmechanik doch "fassbar" gemacht werden kann. Als mein Doktorvater hat er meine ersten Schritte in die Theorie des Atom- und Molekülbaus geführt, und von ihm habe ich auch manchen didaktischen Kniff gelernt.

Sehr zu Dank verpflichtet bin ich meinem letzten Doktoranden, Herrn Dr. Thomas Ritschel, der wesentliche Teile des Manuskripts kritisch gelesen hat und mit dem ich häufig diskutieren konnte. Er hat überdies die gesamte computergrafische Umsetzung der Abbildungsentwürfe geleistet und dafür zahlreiche Neuberechnungen durchgeführt.

Die finale Phase der Abfassung des Manuskripts und seine technische Fertigstellung fielen verlagsseitig in eine Zeit erheblicher Veränderungen: die Verlagshäuser B. G. Teubner (mit diesem Verlag wurde das Buchprojekt geplant und vereinbart) und F. Vieweg schlossen sich zusammen, wenig später erfolgte die Eingliederung des Vieweg+Teubner Verlags in den Springer-Verlag. Bei alledem habe ich für meine Vorstellungen und Anliegen stets große Aufgeschlossenheit und ein hohes Maß an Entgegenkommen erfahren. Die angenehme und engagierte Zusammenarbeit, zuerst mit Herrn Ulrich Sandten (B. G. Teubner) und dann besonders mit Frau Kerstin Hoffmann (B. G. Teubner und Springer-Verlag), soll daher an dieser Stelle nachdrücklich dankend hervorgehoben werden.

*Gewidmet meiner Frau Brigitta –
ohne ihr liebevolles Verständnis
wäre dieses Buch nicht zustande gekommen*

Berlin, im Herbst 2014

Lutz Zülicke



<http://www.springer.com/978-3-658-00488-0>

Molekulare Theoretische Chemie

Eine Einführung

Zülicke, L.

2015, XXVIII, 1101 S. 179 Abb., Softcover

ISBN: 978-3-658-00488-0