

Dr. Jeremiah James, Fritz-Haber-Institut und Max-Planck-Institut für Wissenschaftsgeschichte, Berlin

Prof. Dr. Matthias Fuchs, Fachbereich Physik, Universität Konstanz

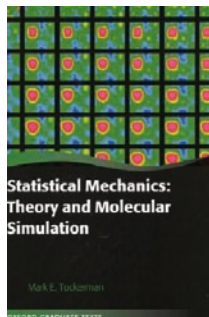
Aufenthalte in London, Kopenhagen und Leipzig. Hierbei konzentriert sich Karachalios auf den Inhalt der Forschung, wobei er die spezifischen intellektuellen Gegebenheiten an jedem einzelnen Ort und deren Einfluss auf die Arbeit Hückels hervorhebt. Das Herzstück des Buches bildet die detaillierte Geschichte der Entwicklung der Theorien Hückels zur Doppelbindung und zur Aromatizität, welche er 1929 in seiner Zeit als Stipendiat in Kopenhagen begann und 1937 abschloss, als er seine Dozentur an der TH Stuttgart aufgab, um einem Ruf nach Marburg zu folgen. Dies war die Glanzzeit von Hückels Berufsleben, in der er neben der Entwicklung der genannten Theorien auch eine heftige Debatte mit Linus Pauling über die Anwendung der Quantenmechanik auf die Molekülstruktur führte.

Außer einem kurzen Exkurs zu Hückels Verhalten in der NS-Zeit schildert Karachalios auch hier Hückels privates Umfeld nur kurz, was allerdings dem spärlichen Archivbestand geschuldet sein dürfte und den Stellenwert des Buches nicht schmälert. Schwerer wiegt der Mangel an einer eingehenden Beschäftigung mit dem verwickelten Verhältnis zwischen Physik und Chemie in den 1920er und 1930er Jahren in Deutschland. Dies mindert die Bedeutung des Buches für die Geschichte der Physik und Chemie ein wenig. Karachalios sieht in diesem Spannungsfeld den Grund für den begrenzten beruflichen Erfolg Hückels. Leider diskutiert er nicht die Umstände der Verleihung des Nobelpreises für Chemie an Peter Debye, ein mögliches Gegenargument zu dieser Hypothese. Das selbstgesteckte Ziel, „to draw a more complete picture of Erick Hückel's important research efforts, in order to better assess his path-breaking papers on quantum chemistry“ hat Karachalios jedoch eindrucksvoll erreicht.

Jeremiah James

■ Statistical Mechanics: Theory and Molecular Simulation

Mark Tuckerman, Professor an der Chemie-Fakultät und am Courant-Institut für Mathematik der Universität von New York, spannt in seinem Buch über Statistische Mechanik den weiten Bogen von den klassischen und quantenmechanischen Grundlagen hin zu konkreten anwendungsorientierten Umsetzungen auf dem Computer. Sein Ziel ist es, Master-Studenten



M. Tuckerman: *Statistical Mechanics: Theory and Molecular Simulation*
Oxford University Press 2010, 712 S., geb., 90 \$
ISBN 9780198525264

und Doktoranden der Physik, aber auch der Chemie und anderer materialwissenschaftlicher Fächer, die Grundlagen der Statistischen Mechanik und deren numerische Anwendungen in Computersimulationen gleichzeitig und aufeinander abgestimmt zu vermitteln.

Fast jedes Kapitel beginnt mit den theoretischen Konzepten und Gesetzmäßigkeiten und diskutiert dann detailliert die zugehörigen Computeralgorithmen und Simulationen, zumeist bis zu den aktuell eingesetzten Verfahren. En passant lernt der Leser auch einige der wichtigsten der physikalischen Phänomene kennen, die in den traditionellen Darstellungen der Statistischen Mechanik mehr im Vordergrund stehen: z. B. ideales klassisches und quantenmechanisches Gas, Phasenübergänge und deren theoretische Beschreibung und Struktur- und Streufunktionen. Andere Höhepunkte, wie z. B. die Gibbssche Diskussion der Phasendiagramme oder Debyes Theorie der Phononen, fehlen allerdings. Die Darstellung konzentriert sich darauf, Studenten aber auch wissenschaftlich Forschenden ein fundiertes Verständnis von Com-

putersimulationen zu vermitteln und sie zu befähigen, diese selbst einzusetzen. Als Grundlage dienen eine Fülle von Simulationstechniken und auch deren teilweise aufwändige theoretische Grundlagen (z. B. Pfadintegrale).

Tuckerman beginnt mit der verzahnten Darstellung von Theorie und Simulationstechnik am Beispiel des mikrokanonischen Ensembles und der Molekulardynamik. Dabei bespricht er die klassischen Verlet-Algorithmen und die Vorteile symplektischer Methoden. Die Monte-Carlo-Technik stellt Tuckerman nach der Beschreibung des großkanonischen Ensembles vor und endet dabei mit der erst zwölf Jahre alten Technik des „Transition Path Sampling“. Um die Grundlagen der Quantenmechanik und der Quantenstatistik darzustellen, benötigt Tuckerman drei weitere Kapitel, welche auch die vertrauten Effekte von Fermionen und Bosonen (Bose-Einstein-Kondensation) bei tiefen Temperaturen beinhalten. Feynmans Pfadintegrale bieten den Einstieg in Quanten-Molekulardynamik. Zwei weitere Kapitel behandeln zeitabhängige thermische Fluktuationen und die Theorie der linearen Antwort klassisch und quantenmechanisch. Nach einem Kapitel über (klassische) stochastische Bewegungsgleichungen endet das Buch mit einem kurzen Kapitel über kritische Phänomene.

Tuckerman gelingt es gut, seine These „Die Computersimulation ist die numerische Realisierung der Statistischen Mechanik“ mit konkreten und nützlichen Techniken zu belegen. Seine Auswahl von Themen, die z. B. quantenmechanische Simulationsmethoden einschließt, zeichnet das Buch aus. Die Darstellung ist sehr ausführlich und seine Korrekturseite im Internet begrüßenswert. Ich sehe in Tuckermans Buch eine gelungene Ergänzung im Markt der Lehrbücher über Statistische Mechanik und Computersimulationen, welches eine nützliche Synthese beider Themen präsentiert.

Matthias Fuchs