

(Received 29. 9.1998)

Predstavitev knjige

***“Exploring Aspects of Computational Chemistry, Concepts and Exercises”*** (J.-M. Andre, D.H. Mosley, M.-C. Andre, B. Champagne, E. Clementi, J.G. Fripiat, L. Leherte, L. Pisani, D.P. Vercauteren, M. Vračko), Presses universitaires de Namur, Namur 1997.

V začetku letošnjega leta je v Belgiji pri založbi *Presses universitaires de Namur* izšla knjiga v dveh delih z naslovom *“Exploring Aspects of Computational Chemistry, Concepts and Exercises”*. Knjigo, ki je plod dolgoletnega raziskovalnega in pedagoškega dela, so napisali sodelavci *Facultes universitaires Notre-Dame de la Paix* iz Namurja J.-M. Andre, D.H. Mosley, M.-C. Andre, B. Champagne, J.G. Fripiat, L. Leherte in D.P. Vercauteren. Pri delu so sodelovali tudi trije zunanji sodelavci: E. Clementi in L. Pisani, sodelavca *Universitaires Luis Pasteur* in M. Vračko, sodelavec *Kemijskega inštituta* iz Ljubljane. Prvi del s podnaslovom *“Concepts”* vsebuje sedem poglavij, ki podajajo pregled osnovnih načel računalniške kvantne kemije, vendar brez formalnih matematičnih izpeljav, saj je na koncu dodan še izčrpen pregled temeljnih del s tega področja, kjer lahko bralec najde vse podrobnosti, ki ga utegnejo zanimati. Drugi del *“Exercises”* sistematično podaja k vsakemu poglavju zbirko računskih nalog različnih težavnostnih stopenj. Nekatere naloge se dajo rešiti s svinčnikom in papirjem s pomočjo kalkulatorja, medtem ko spet druge zaradi numerične zapletenosti zahtevajo uporabo računalnika. Na koncu drugega dela je podan še seznam in krajši opis nekaterih poznanih najbolj uporabljanih kvantnokemijskih računalniških programov.

Začetki kvantne kemije segajo v prva desetletja tega stoletja, ko so bili postavljeni temelji kvantne mehanike. Lahko rečemo, da se je kvantna kemija začela s prvo uspešno razlago kemijske vezi. To je bila vez v molekuli vodika. V tej zgodnji dobi so

se morali znanstveniki omejevati na zelo majhne sisteme, ki so bili za kemijo manj zanimivi, ali pa uporabljati bolj grobe približke. Razvili so vse potrebne teoretične modele in postopke, za praktično uporabo le-teh pa je bilo treba čakati na pojav hitrih in vse zmogljivejših računalnikov v zadnjih tridesetih letih. Pa še potem je precej časa prevladovalo mnenje, da je kvantna kemija (še posebno njen računalniški del) področje, s katerim se praviloma ukvarjajo samo za to usposobljeni znanstveniki, vsekakor pa ne študenti na dodiplomskem študiju. Hitri razvoj računalništva je te trditve postavil na glavo. Danes skoraj povsod v svetu vključujejo osnove računalniške kvantne kemije v dodiplomski študij. Na ljubljanski univerzi poslušajo študenti kemije o tem v četrtem letniku študija v okviru predmeta Struktura atomov in molekul. Računalniška kvantna kemija je interdisciplinarna veda, ki združuje teoretično fiziko, kemijo, matematiko in računalništvo. Z razvojem teoretičnega ozadja in numeričnih algoritmov ter pisanjem računalniških programov se sicer še vedno ukvarjajo specialisti, uporaba programov in vrednotenje rezultatov pa postaja vse bolj potreba velikega dela populacije kemikov. Gre predvsem za seznanjanje z osnovnimi principi, ki so v ozadju računov, znanje o tem, kaj lahko s pomočjo kvantne kemije računamo in kje so njene meje. Prav to pa je področje, ki ga poskuša zapolniti predstavljena knjiga. Osnovno vodilo avtorjev je bilo, da mora biti študij na vsakem nivoju zaključena celota. Program mora vsebovati ustrezno prilagojen pouk o osnovnih načelih in vaje, ki prikazujejo praktično uporabo kvantne kemije. Prav vajam so avtorji posvetili posebno pozornost, saj naj bi študentom posredovale občutek za kritično presojo dobljenih rezultatov.

Jože Koller

FKKT