
Vorwort

In der Chemie, insbesondere in der akademischen Forschung, ist die Computerchemie nicht mehr wegzudenken. Mit ihrer Hilfe können unter anderem Molekülstrukturen, Enthalpien, relative Stabilitäten verschiedener Isomere, Eigenschaften wie der Dipolmoment oder die Polarisierbarkeit, Stabilitäten von Festkörperoberflächen oder komplette Spektren (IR, NMR, UV-VIS etc.) berechnet werden. Obwohl die meisten Eigenschaften auch experimentell zugänglich sind, können Ergebnisse aus quantenmechanischen Rechnungen dabei helfen, die experimentellen Ergebnisse zu verstehen und zu interpretieren. So kann die Computerchemie dabei helfen, komplexe Reaktionsmechanismen aufzuklären, bei denen durch Experimente alleine nicht der komplette Mechanismus verstanden werden kann.¹

Wie aktuell und wichtig quantitative Rechenverfahren sind, zeigt auch der Nobelpreis für Chemie aus dem Jahr 2013, der an drei theoretische Chemiker für die Entwicklung neuer Modelle zur Berechnung großer und komplexer chemischer Systeme vergeben wurde. In diesem *essential* werden daher sowohl grundlegende Methoden als auch heute genutzte moderne Methoden, wie *Coupled Cluster* (Kapitel 3) und die Dichtefunktionaltheorie (Kapitel 4), vorgestellt. Für das Verständnis dieses *essentials* werden Grundkenntnisse in den Bereichen der Mathematik und der Theoretischen Chemie vorausgesetzt. Der Leser sollte mit der Dirac- bzw. Bra-Ket-Notation, Operatoren und der Beschreibung von Elektronen durch Wellen vertraut sein.

Bonn, Deutschland

Daniel Püschner

¹Ein schönes Beispiel hierfür ist die Funktion des Enzyms Cytochrom P450 (Shaik et al. 2004).

Quantitative Rechenverfahren der Theoretischen
Chemie

Ein Einstieg in Hartree-Fock, Configuration Interaction
und Dichtefunktionale

Püschner, D.

2017, X, 54 S. 9 Abb., Softcover

ISBN: 978-3-658-18241-0