

Vorbemerkung

Die Quantentheorie bildet die Basis für das Verständnis der chemischen Bindung und die theoretische Grundlage für die Spektroskopie. Wegen der großen Bedeutung der Spektroskopie bei der Charakterisierung von Materialien und der chemischen Bindung bei der Rationalisierung von chemischen Befunden, ist ein gutes Verständnis der Quantentheorie ein wichtiger Bestandteil der Chemie. Ferner bildet die Quantentheorie auch die Grundlagen für das Gebiet des *Chemical Modelling*, auch Computerchemie genannt, womit Eigenschaften, Strukturen, Reaktionswege etc. mithilfe von Computerrechnungen untersucht werden können. Dieses Gebiet ist eine sehr wichtige Ergänzung der üblichen experimentellen Studien der Chemie.

Die Quantentheorie ist die Theorie, die eingesetzt werden soll, wenn man sehr kleine Systeme behandeln möchte. So gesehen erscheint die Quantentheorie als nur begrenzt relevant für unser alltägliches Leben, wo wir uns normalerweise mit sehr viel größeren Systemen beschäftigen. Deswegen mag es erstaunen, zu wissen, dass schätzungsweise 20 % aller produzierten Güter auf technologischen Entwicklungen basieren, die es ohne die Quantentheorie nicht geben würden.

Ferner wird *Chemical Modelling* auch für eher experimentell orientierte Chemiker zunehmend wichtiger. In der Chemie werden heutzutage selten wissenschaftliche Arbeiten zur Veröffentlichung in angesehenen chemischen Zeitschriften angenommen, wenn die experimentellen Studien nicht durch begleitende theoretische Rechnungen unterstützt und ergänzt werden. Bei einer Doktorarbeit, bei der man eher experimentell arbeitet, ist es also wichtig, auch Rechnungen durchzuführen (oder durchführen zu lassen), wenn die Ergebnisse veröffentlicht werden sollen. Und mit dem Spruch im Kopf, dass eine unveröffentlichte wissenschaftliche Arbeit eine sinnlose Arbeit ist, muss man erkennen, dass Publizieren ein wesentlicher Bestandteil der Doktorarbeit ist.

Letztendlich können theoretische Rechnungen sehr viele experimentelle Arbeiten ersetzen. Dies soll durch ein Beispiel aus eigener Erfahrung erläutert werden. An der Universität Tianjin in China gab es eine Arbeitsgruppe, die sich mit der Herstellung von Materialien für Anwendungen in Solarzellen beschäftigte. Ziel war es, Materialien mit maximal großer Ausbeute (d. h., dass maximal viel elektrischer Strom aus der Sonneneinstrahlung gewonnen wird) zu identifizieren. Dazu untersuchten mehrere der Mitglieder der (etwa 50 Personen starken) Arbeitsgruppe Materialien basierend auf Porphyrinen (diese bilden die Bausteine der sog. Grätzel Zellen, ein Typ von Solarzellen). Alle möglichen Tricks der organischen Chemie wurden angewandt, um die Porphyrine zu modifizieren. Jede Synthese einer neuen Verbindung zusammen mit der anschließenden Untersuchung in einer Solarzelle nahm die Arbeit von einer Person für etwa ein Jahr in Anspruch, und sehr oft musste letztendlich erkannt werden, dass die neue Verbindung die Anforderungen nicht erfüllte. Eine theoretische Rechnung kann in etwa einer Woche abgeschlossen werden, und die Person, die eine solche Rechnung durchführt, kann mehr als eine Verbindung (beispielsweise zehn Verbindungen) parallel behandeln.

In einem Jahr können deswegen von einem einzigen Theoretiker etwa 500 Verbindungen analysiert werden, also viel mehr als die eine Verbindung, die der Experimentator herstellt und untersucht. Auch wenn die Rechnungen unter gewissen Ungenauigkeiten leiden, sind die Ergebnisse solcher Rechnungen sehr relevant, um im Labor gezielter aussichtsreiche Verbindungen herzustellen. Also, wie man sieht: Theoretische Rechnungen können sehr hilfreiche Informationen für Experimentatoren liefern.

Ziel des vorliegenden Skriptes ist, die Grundlagen der Quantentheorie vorzustellen, sowie Beispiele ihrer Anwendung auf atomare und molekulare Systeme zu behandeln. Auch Beispiele für die Anwendung dieser Theorie in der Computerchemie werden präsentiert. Es richtet sich an Studierende der Chemie, die sich im zweiten oder dritten Jahr ihres Bachelorstudiums befinden. Sehr hilfreich wäre es, wenn der Leser erste Kenntnisse zur Quantentheorie besitzt und dadurch schon von z. B. Orbitalen, dem Aufbauprinzip oder der chemischen Bindung gehört hat. Aber auch ohne diese Vorkenntnisse ist es prinzipiell möglich, sich den Stoff im Skript anzueignen, wenn auch nicht ohne einige Anstrengungen. Gelegentlich werden Beispiele kurz diskutiert, die erst später in Detail behandelt werden, und vor allem dann sind solche Vorkenntnisse sehr hilfreich, wenn auch nicht zwingend notwendig.

August 2023

Michael Springborg