

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Theoretische Chemie im 19. Jahrhundert	3
3	Die Ursprünge der modernen Theoretischen Chemie aus der Physik	13
3.1	Quantentheorie und Quantenmechanik	13
3.2	Erich Hückel	21
3.3	Hans Hellmann	25
4	Die Gründungsphase der modernen Theoretischen Chemie aus der Chemie	31
4.1	Vorläufer	31
4.2	Hermann Hartmann	33
4.3	Weitere Repräsentanten der Gründungsphase	37
5	Die Etablierung an den Universitäten	55
5.1	Die resultierenden Zentren	55
5.1.1	Frankfurt	55
5.1.2	Marburg	73
5.1.3	Göttingen	76
5.1.4	München	85
5.1.5	Berlin	91
5.1.6	Stuttgart	92
5.1.7	Gießen	95
5.1.8	Wien	102
5.1.9	Zürich	107
5.2	Weitere Einflüsse	110
5.2.1	Inland	110
5.2.2	Ausland	115
5.3	Entwicklung in der DDR	123
5.3.1	Ostberlin	123

5.3.2	Leipzig	124
5.3.3	Dresden	128
5.3.4	Jena	130
5.3.5	Merseburg	131
5.3.6	Halle	132
6	Nationale und internationale Akzeptanz	135
6.1	Ausbildung von Forschungsrichtungen	135
6.1.1	Modellmethoden	136
6.1.2	Semiempirische Methoden	137
6.1.3	Ab initio-Methoden einschließlich relativistischer Effekte	141
6.1.4	Dichtefunktionalmethoden und Molekulardynamik	145
6.1.5	Green'sche Funktionen und vibronische Kopplung	147
6.1.6	Simulationsmethoden	150
6.2	Anwendungen in der Chemie	151
6.2.1	Moleküle und Cluster	151
6.2.2	Reaktionsdynamik	155
6.2.3	Spektroskopie	158
6.2.4	Oberflächen und Katalyse	160
6.2.5	Festkörper	164
7	Weitere Entwicklung bis heute	165
8	Die Zeitschrift Theoretica Chimica Acta	177
9	Sommerschulen für Theoretische Chemie	181
10	Symposien für Theoretische Chemie	187
11	Die Arbeitsgemeinschaft Theoretische Chemie	193
12	Das Info Theoretische Chemie	197
13	Tabellen	199
14	Quellen und Danksagung	221
14.1	Quellen	221
14.2	Danksagung	221
	Literatur	223
	Sachverzeichnis	283
	Personenverzeichnis	289