

---

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Theoretische Chemie im 19. Jahrhundert</b>	<b>3</b>
<b>3</b>	<b>Die Ursprünge der modernen Theoretischen Chemie aus der Physik</b>	<b>13</b>
3.1	Quantentheorie und Quantenmechanik	13
3.2	Erich Hückel	21
3.3	Hans Hellmann	25
<b>4</b>	<b>Die Gründungsphase der modernen Theoretischen Chemie aus der Chemie</b>	<b>31</b>
4.1	Vorläufer	31
4.2	Hermann Hartmann	33
4.3	Weitere Repräsentanten der Gründungsphase	37
<b>5</b>	<b>Die Etablierung an den Universitäten</b>	<b>55</b>
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
<b>6 Nationale und internationale Akzeptanz . . . . .</b>	<b>135</b>
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
<b>7 Weitere Entwicklung bis heute . . . . .</b>	<b>165</b>
<b>8 Die Zeitschrift Theoretica Chimica Acta . . . . .</b>	<b>177</b>
<b>9 Sommerschulen für Theoretische Chemie . . . . .</b>	<b>181</b>
<b>10 Symposien für Theoretische Chemie . . . . .</b>	<b>187</b>
<b>11 Die Arbeitsgemeinschaft Theoretische Chemie . . . . .</b>	<b>193</b>
<b>12 Das Info Theoretische Chemie . . . . .</b>	<b>197</b>
<b>13 Tabellen . . . . .</b>	<b>199</b>
<b>14 Quellen und Danksagung . . . . .</b>	<b>221</b>
14.1 Quellen . . . . .	221
14.2 Danksagung . . . . .	221
<b>Literatur . . . . .</b>	<b>223</b>
<b>Sachverzeichnis . . . . .</b>	<b>283</b>
<b>Personenverzeichnis . . . . .</b>	<b>289</b>