



Springer Spektrum

1.
Auflage

1. Aufl. 2017, X, 54 S. 9 Abb.

Gedrucktes Buch

Softcover

Gedrucktes Buch

Softcover

ISBN 978-3-658-18241-0

£ 9,99 | CHF 17,00 | 14,01 € | 15,41

€ (A) | 14,99 € (D)

lieferbar

Rabattgruppe

Standard (0)

Produktkategorie

Heft

Reihe

essentials

Chemie : Theoretische und rechnergestützte Chemie

Püschner, Daniel

Quantitative Rechenverfahren der Theoretischen Chemie

Ein Einstieg in Hartree-Fock, Configuration Interaction und Dichtefunktionale

- **Tiefgehendes Verständnis der Hartree-Fock-Theorie**
- **Eine Einführung in CI, CC und DFT**
- **Quantitative Rechenverfahren sind aktuell und wichtig**

Daniel Püschner stellt sowohl grundlegende Methoden der Computerchemie als auch heute genutzte moderne Methoden wie Coupled Cluster und die Dichtefunktionaltheorie vor. Mithilfe der Wellenfunktionstheorie wird in diesem essential gezeigt, wie die Energie eines Systems berechnet werden kann. Anschließend geht der Autor auf die Probleme der behandelten Methoden ein und zeigt, wie diese systematisch behoben werden können. Insbesondere in der Forschung ist die Computerchemie heutzutage nicht mehr wegzudenken. Obwohl die meisten Eigenschaften auch experimentell zugänglich sind, können Ergebnisse aus quantenmechanischen Rechnungen dabei helfen, die experimentellen Ergebnisse zu verstehen und zu interpretieren. Ein grundlegendes Verständnis ist daher auch für Experimentalchemiker unerlässlich, weshalb im Rahmen des Chemiestudiums die Grundlagen der Theoretischen Chemie behandelt werden. Für dieses essential werden Grundkenntnisse in den Bereichen der Mathematik und der Theoretischen Chemie ebenfalls vorausgesetzt.

Bestellen Sie online unter springer.com/booksellers

Springer Nature Customer Service Center GmbH

Customer Service

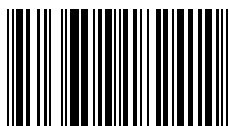
Tiergartenstrasse 15-17

69121 Heidelberg

Germany

T: +49 (0)6221 345-4301

row-booksellers@springernature.com



ISBN 978-3-658-18241-0 / BIC: PNRP / SPRINGER NATURE: SCC25007

€ (D) sind gebundene Ladenpreise in Deutschland und enthalten 7 % für Printprodukte bzw. 19 % MwSt. für elektronische Produkte. € (A) sind gebundene Ladenpreise in Österreich und enthalten 10 % für Printprodukte bzw. 20 % MwSt. für elektronische Produkte. Die mit * gekennzeichneten Preise sind unverbindliche Preisempfehlungen und enthalten die landesübliche MwSt. Preisänderungen und Irrtümer vorbehalten.

Part of **SPRINGER NATURE**