



Daniel Püschner

Quantitative Rechenverfahren der Theoretischen Chemie

Ein Einstieg in Hartree-Fock, Configuration Interaction und Dichtefunktionale

Reihe: essentials

- Tiefergehendes 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.

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

Gedrucktes Buch

Softcover

[1] 14,99 € (D) | 15,41 € (A) | CHF 17,00

eBook

[2] 4,99 € (D) | 4,99 € (A) | CHF 5,50

Erhältlich bei Ihrer Bibliothek oder springer.com/shop

Erhältlich bei Ihrem Buchhändler oder – Springer Nature Customer Service Center GmbH, Haberstrasse 7, 69126 Heidelberg, Germany / Call: + 49 (0) 6221-345-4301 / Fax: +49 (0)6221-345-4229 / Email: customerservice@springer.com / Web: springer.com

[1] € (D) sind gebundene Ladenpreise in Deutschland und enthalten 7% MwSt; € (A) sind gebundene Ladenpreise in Österreich und enthalten 10% MwSt. CHF und die mit [2] gekennzeichneten Preise für elektronische Produkte sind unverbindliche Preisempfehlungen und enthalten die landesübliche MwSt. Programm- und Preisänderungen (auch bei Irrtümern) vorbehalten. Es gelten unsere Allgemeinen Liefer- und Zahlungsbedingungen. Springer-Verlag GmbH, Handelsregistersitz: Berlin-Charlottenburg, HR B 91022. Geschäftsführung: Haank, Mos, Hendriks

