

Das bedeutende Wissenschaftsgebiet Chemie wird in die drei Bereiche Anorganische, Organische und Physikalische Chemie unterteilt, wobei die Physikalische Chemie die Bereiche Thermodynamik, Reaktionskinetik, Elektro- und Fotochemie und Quantenchemie enthält. In dieser Einführung wird die Quantenchemie anschaulich und verständlich dargestellt, ohne dabei auf wissenschaftliche Exaktheit zu verzichten. Quantenchemie bedeutet, dass der Aufbau, die Struktur, die chemische Bindung und die spektroskopischen Eigenschaften der Atome und Moleküle behandelt werden. Dieses Verständnis befähigt den Chemiker und Physiker, die Struktur der Atome und die chemische Bindung in Molekülen zu verstehen. Für viele Bereiche der Chemie ist die Quantenchemie von grundlegender Bedeutung.

In diesem Springer Kompaktlehrbuch wird die Quantenchemie auf der Grundlage der Wellenmechanik von E. Schrödinger behandelt. Die Elektronen werden hierbei als Materiewellen angesehen, genauso wie Schall-, Licht- und Wasserwellen; dadurch werden Begriffe wie die Aufenthaltswahrscheinlichkeit von Elektronen vermieden, die bereits A. Einstein heftig kritisiert hat („Gott würfeln nicht!“). Die Diskussion hierüber ist in letzter Zeit wieder aufgeflammt (<http://arxiv.org/abs/1111.3328v1>). Weiterhin wird bei der Lösung der Schrödingergleichung auf komplexe Größen verzichtet und es werden anschauliche reale trigonometrische Funktionen verwendet.