

Interdisziplinäre Forschungssituation und Kooperationsform in der Quantenchemie

Erhard Gey

Obleich die anlässlich der Verleihung des Nobelpreises für Chemie 1966 an Robert Mulliken von ihm geäußerte Vermutung, dass künftig viele Chemiker anstatt zu experimentieren quantenchemische Berechnungen durchführen würden, nur im begrenzten Umfang eingetroffen ist, sind seit damals dank vielfältiger methodischer Entwicklungen, die teilweise auf Anleihen bei anderen Teilgebieten der Physik wie Theorie der Atome, Festkörper, Flüssigkeiten und Lösungen, teilweise auf Erkenntnissen der Spektroskopie, der Thermochemie und der chemischen Reaktionskinetik beruhen, beträchtliche Fortschritte bei der qualitativen und im steigenden Ausmaß auch der quantitativen Voraussage von Struktur und Eigenschaften immer größerer und komplexerer chemischer Systeme, die zum Teil auch von enormer praktischer Bedeutung sind, erreicht worden. Einerseits wurden erprobte Standardprogrammversionen wie die dank Quantum Chemistry Program Exchange und später als ProgrammPaket HYPERCHEM verfügbaren semiempirischen Methoden und seit den siebziger Jahren ab initio-Versionen, insbesondere GAUSSIAN von John Pople und Mitarbeitern leicht zugänglich gemacht, die dank der Entwicklung immer leistungsfähigerer Computer und vollkommenerer Rechenverfahren zunehmend vielseitig genutzt werden konnten. Dabei erwies sich für viele chemisch relevante Systeme neben den ab initio-SCF LCAO MO-Versionen die Dichtefunktionaltheorie in der Version von Walter Kohn und L. Sham als besonders effektiv; das fand seine Würdigung unter anderen in der Vergabe des Nobelpreises für Chemie 1998 an Pople und Kohn.

Heute existiert weltweit an nahezu jeder Hochschule ein Lehrstuhl für Quantenchemie oder Theoretische Chemie, der in die Studentenausbildung fest einbezogen ist und laufend Diplomarbeiten und Promotionen vergibt, in denen meist neue Wege zur Lösung methodisch-theoretischer oder chemischer Fragestellungen gesucht werden. Dabei spielt auch die Kooperation mit Experimentatoren auf den Gebieten der Synthesechemie und der Instrumentalanalytik eine wichtige Rolle. Gewöhnlich tauchen beim Einsatz von Routineverfahren zur Bestätigung oder zur Voraussage experimenteller Befunde Fragen oder Unklarheiten auf, die nur mittels methodischer Neuentwicklungen zu klären sind. In diesem Zusammenhang spielt auch die nationale und internationale interinstitutionelle Kooperation in Form von Studienaufenthalten und Fachtagungen wesentliche Rolle. Man schätzt, dass gegenwärtig etwa 20 Prozent der chemischen Publikationen, die zunehmend auch über moderne Medien wie das Internet zugänglich sind, sich teilweise oder vollständig mit quantenchemischen Fragestellungen beschäftigen. Allerdings werden theoretische Berechnungen nicht die Experimente ersetzen, die letztlich über den Wahrheitsgehalt einer Aussage entscheiden. Theoretische Befunden werden einerseits zur Erklärung von Messungen und Synthesen und andererseits bei der Voraussage von experimentell nur schwierig oder gar nicht zugänglichen Daten herangezogen. Quantenchemie und experimentelle Chemie sind auf den Austausch von Ideen und Erkenntnissen, der Forschung und Anwendung auf beiden Gebieten verbindet, angewiesen.

Es wird ein kurzer Überblick über die Entwicklung der Quantenchemie seit ihrer Entwicklung seit 1927 gegeben, wobei zwischen erster (1927-33), zweiter (1933-50), dritter (1950-65) und vierter Periode (ab 1965) unterschieden wird.¹ Dabei wird auch auf die Situation in Deutschland und speziell an den universitären und außeruniversitären Forschungseinrichtungen eingegangen.

1. Gey, E., Der Zusammenhang von interdisziplinären Forschungssituationen und Kooperationsverhalten bei der Bildung und Entwicklung neuer Spezialgebiete, dargestellt am Beispiel der Quantenchemie. - In: Interdisziplinarität in der Forschung, Analysen und Fallstudien. Hrsg. v. Heinrich Parthey und Klaus Schreiber. Berlin: Akademie-Verlag 1983. S. 151 - 175.