

H. C. Longuet-Higgins und J. A. Pople: Theoretische Chemie

Werner Kutzelnigg*

Innerhalb weniger Wochen haben uns zwei Theoretische Chemiker für immer verlassen, die trotz gewisser Gemeinsamkeiten kaum verschiedener hätten sein können, und die, jeder auf seine Art, ihr Fach in der zweiten Hälfte des 20. Jahrhunderts entscheidend geprägt haben. Sie waren beide Engländer, und sie kamen aus den berühmten Schulen von Lennard-Jones und Coulson. Beide haben ihre wissenschaftliche Laufbahn mit Arbeiten zur Hückelschen Theorie der π -Elektronensysteme (HMO-Theorie) begonnen, aber ihre weiteren Rollen waren sehr unterschiedlich. Während Longuet-Higgins die Art von Theorie verkörperte, die man am besten auf der Rückseite eines Briefumschlags formuliert, wurde Pople ein Vertreter der Computerchemie, deren große Erfolge außer auf der Intelligenz der Quantenchemiker auch auf den spektakulären Fortschritten der Computertechnologie beruhen. Es gibt allerdings auch mehrere gemeinsame Arbeiten von Longuet-Higgins und Pople, u. a. über den Renner-Teller-Effekt.^[1]

Hugh Christopher Longuet-Higgins (1923–2004)

Longuet-Higgins hat bei C. A. Coulson in Oxford promoviert und gemeinsam mit seinem Lehrer eine Reihe von sehr schönen Arbeiten zur HMO-Theorie publiziert, die wesentlich dazu beigetragen haben, dass diese Theorie eine ästhetisch ansprechende und mathematisch anspruchsvolle Gestalt bekam,^[2–4] z. B. durch die Formulierung der HMO-Störungstheorie.^[2] Mir erscheint eine Arbeit bemerkenswert, bei der für eine spezielle Verbindungsklasse die HMO-Koeffizienten ohne jede Rechnung konstruiert werden können.^[3,4] Longuet-Higgins wurde 1954 sehr jung

[*] Prof. Dr. W. Kutzelnigg
Fakultät für Chemie der
Ruhr-Universität Bochum
(Deutschland)

zum Nachfolger von Lennard-Jones nach Cambridge berufen, als dieser an die neugegründete Reform-Universität nach Keele (Staffordshire) ging.

Zu den für die Chemie wichtigen Arbeiten von Longuet-Higgins gehören diejenigen zu den Elektronenmangelverbindungen des Bors. Obwohl die Theorie dieser Verbindungsklasse meist – und sicher nicht zu Unrecht – mit dem Namen W. N. Lipscomb verbunden wird, stammt die entscheidende Arbeit über die Elektronenstruktur des B_2H_6 von Longuet-Higgins aus seiner Studenzeit.^[5] Dieser hat auch, im Wesentlichen mit gruppentheoretischen Argumenten, die Stabilität von CaB_6 verständlich gemacht sowie die Existenz von $B_{12}H_{12}^{2-}$ vorhergesagt.^[4,6] Auch in einem anderen Zusammenhang wurden die Beiträge von Longuet-Higgins unter Wert gehandelt. Mit Hilfe von Korrelationsdiagrammen lieferte er eine Erklärung der Regeln, die wir heute mit den Namen Woodward und Hoffmann verbinden. Dabei ließ er das etwas vage Konzept von der Erhaltung der Orbitalsymmetrie weit hinter sich.^[7]

Zwei weitere Entdeckungen von Longuet-Higgins werden sicher dazu beitragen, dass sein Name im Gedächtnis bleibt. Dabei handelt es sich zum einen um das erste Beispiel für das, was man heute als Berry-Phase bezeichnet, nämlich den Vorzeichenwechsel der Wellenfunktion bei einem geschlossenen Weg um eine konische Überschneidung.^[8] Der andere epochale Beitrag von Longuet-Higgins ist die Theorie der Symmetriegruppen nicht-starrer Moleküle, wobei alle durchführbaren Permutationen äquivalenter Atome berücksichtigt werden.^[9] Ein Verständnis der Rotations-Schwingungs-Spektren fluxionaler Moleküle und vor allem der Spektren im Millimeterbereich wäre ohne diese Theorie nicht denkbar.^[10]

Longuet-Higgins hatte eine scharfe Zunge und eine Neigung zu geistreichen



H. C. Longuet-Higgins

Bemerkungen auf Kosten anderer. Über eine Parodie auf die grünen Technical Reports aus Uppsala muss sich Löwdin sehr geärgert haben. Besonders unter Longuet-Higgins gelitten hat S. F. Boys, der formal einer seiner Untergebenen war. Für die vorwiegend numerischen Arbeiten von Boys hatte Longuet-Higgins wenig übrig. Vielleicht haben die Vorbehalte von

Theorie auf einem Briefumschlag

Longuet-Higgins gegenüber Boys damit zu tun, dass er sehr wohl spürte, dass der Vorschlag von Boys, quantenchemische Rechnungen in einer Basis von Gauß-Funktionen durchzuführen,^[11] in seiner Tragweite den wichtigsten Beiträgen von Longuet-Higgins in

nichts nachstand und dass aus den Arbeiten von Boys eine zukunfts-trächtige Forschungsrichtung der Theoretischen

Chemie hervorgehen würde, an der er, Longuet-Higgins, keinen Anteil haben würde und auch nicht haben wollte. Im Zusammenhang damit steht vermutlich seine von vielen nicht verstandene Entscheidung, bereits 1967 seine erfolgreiche Tätigkeit innerhalb der Theoretischen Chemie zu beenden, den Lehrstuhl in Cambridge aufzugeben und sich in Edinburgh Aufgaben im Bereich der Neuroinformatik und theoretischen Psychologie zuzuwenden, z. B. der Wahrnehmung von Musik.^[12] Mir ist nicht gelungen herauszufinden, ob Longuet-Higgins sich in den Neurowissenschaften ein ähnlich hohes Ansehen erworben hat wie zuvor in der Chemie. Ich hatte vor sechs Jahren bei einer Veranstaltung zum Gedenken an S. F. Boys Gelegenheit, ihn zu fragen, ob er bereue, die Theoretische Chemie verlassen zu haben. Er antwortete nur, dass er nie etwas bereue. Sein Vermächtnis als Theoretischer Chemiker war vielleicht ein Vortrag^[13] auf einer Faraday Discussion in Brighton, wo er u. a. vorschlug, die Chemiker in drei Klassen einzuteilen, Experimentatoren, Rechner („computationalists“) und Theoretiker. Er hat aber wohl nicht viele Anhänger für diese scharfe Trennung von Theorie und Computerchemie gefunden.

John A. Pople (1925–2004)

Pople hat bei Lennard-Jones in Cambridge promoviert. Nach Arbeiten im Bereich der statistischen Mechanik hat



J. A. Pople

er insbesondere auf drei Arbeitsgebieten Hervorragendes geleistet: der Theorie der magnetischen Eigenschaften von Molekülen, der semiempirischen Quantenchemie und der Ab-initio-Quantenche-

mie. Die Arbeiten zum ersten der drei Arbeitsgebiete^[14] basieren vorwiegend auf der HMO-Methode und sind heute etwas in Vergessenheit geraten, aber sie waren zu ihrer Zeit für das Verständnis insbesondere von hochaufgelösten NMR-Spektren von großer Bedeutung.

Es wird berichtet, dass Pople, damals Leiter des National Physical Laboratory in Teddington, in eine königliche Kommission berufen wurde, die herausfinden sollte, warum es so viele britische Wissenschaftler in die USA ziehe. Er hat dies offenbar herausgefunden, denn kurz darauf übersiedelte er 1964 selbst in die USA, wo er bis an sein Lebensende wissenschaftlich tätig war, hauptsächlich an der Carnegie-Mellon University in Pittsburgh, zuletzt an der Northwestern University bei Chicago.

Bis in die späten 1950er Jahre waren auf Moleküle von chemischem Interesse nur semiempirische Methoden anwendbar, d. h. solche, die zwar aus der Quantentheorie hergeleitet werden können,^[4] aber mit so groben Näherungen, dass brauchbare Ergebnisse nur zu erhalten waren, wenn man gewisse Größen als empirisch anpassbare Parameter ansah. Die HMO-Methode war zunächst das wichtigste semiempirische Verfahren zur Beschreibung von π -Elektronensystemen. Sie ist eine Einelektronentheorie und berücksichtigt die Elektronenwechselwirkung nicht explizit. Pople entwickelte eine nahe liegende Verbesserung der Hückel-Näherung, indem er die Elektronenwechselwirkung selbstkonsi-

stent behandelte.^[15] Etwa gleichzeitig damit schlugen Pariser und Parr^[16] eine HMO-Theorie mit Elektronenwechselwirkung vor, bei der eine semiempirische Korrektur der letzteren eine große Rolle spielte. Die beiden Ansätze flossen zu der Näherung zusammen, die unter dem Namen PPP (Pariser-Parr-Pople) berühmt wurde und die die Theorie der UV/Vis-Spektren konjugierter π -Elektronen-Systeme über etwa zwei Jahrzehnte dominierte.

Es ist bemerkenswert, dass zunächst nur die „mobilen“ π -Elektronen in konjugierten Systemen einer semiempirischen Beschreibung zugänglich waren.^[4] Auf semiempirische Ansätze für alle Elektronen (unter Einschluss der weitgehend lokalisierten π -Elektronen) musste man warten, bis einerseits R. Hoffmann mit der Extended-Hückel-Theorie (EHT) eine Einelektronentheorie vorstellte,^[17] allerdings mit Berücksichtigung der Überlappung der Atomorbitale, andererseits Pople mit dem CNDO-Ansatz^[18,19] eine Verallgemeinerung der PPP-Methode (d. h. mit Elektronen-Wechselwirkung, aber ohne Überlappung – CNDO steht für „complete neglect of differential overlap“) für alle Valenzelektronen vorschlug. Der Begriff CNDO hat für etwas

Verwirrung gesorgt, denn die Vernachlässigung der Überlappung ist, vor allem für σ -Orbitale, sicher unzulässig. Diese Näherung kann man allerdings zumindest plausibel machen, wenn man unterstellt, dass die Basis-Funktionen eigentlich nicht die Atomorbitale selbst, sondern orthogonalisierte Atomorbitale sind.^[4] Insgesamt hat die EHT-Methode wohl mehr Anwendungen in der anorganischen Chemie und CNDO mehr in der organischen Chemie gefunden. Es gab viele Modifikationen von CNDO, vor allem aus der Schule von M. J. S. Dewar. Die ausgefeilteste von diesen, die auf W. Thiel zurückgeht,^[20] wird noch heute mit Erfolg eingesetzt, insbesondere bei sehr großen konjugierten Systemen. Methoden wie PPP oder CNDO wurden meist – und dies oft in polemischer Weise – als extrem grobe Vereinfachungen der exakten Theorie angesehen. Man kann sie aber auch, wie das heute zunehmend geschieht,

als Verfeinerungen des in der Festkörperphysik immer noch populären Hubbard-Modells ansehen. Hier wird in einem parametrisierten Modell berücksichtigt, dass es in einem Molekül einerseits kurzreichweitige (überlappungsabhängige), andererseits langreichweitige (Coulomb-artige) Wechselwirkungen gibt.

Als sich J. A. Pople entschloss,^[21] die semiempirische Theorie aufzugeben und sich der Ab-initio-Arbeitsrichtung anzuschließen (sein langjähriger Weggenosse Dewar hat ihm das wohl nie verziehen), war diese bereits den Kinderschuhen entwachsen und bemerkenswert erfolgreich. Pople fand gleichsam ein gemachtes Bett vor. Während er im engen Kreis der Ab-initio-Theoretiker zunächst als Außenseiter galt oder gar als jemand, der das Rad neu erfinden wollte, wurde er aus der Sicht der theoretisch interessierten Organiker bald die unumstrittene Autorität in Sachen Ab-initio-Theorie. Dies lag weniger an Poples sehr wohl beachtlichen Beiträgen zur Verbesserung der quantenchemischen Methoden und Programme

(z. B. zum Einstand ein beschleunigtes Integralprogramm) als an seiner Konzeption einer Computerchemie, zu der gehörte, dass er die Erfahrungen aus seiner

semiempirischen Zeit voll einbrachte. Ein „traditioneller“ Ab-initio-Theoretiker beschäftigte sich in der Regel mit nur einem System gleichzeitig (etwa der Potentialhyperfläche für eine chemische Reaktion) und versuchte, im Rahmen der verfügbaren Methoden die für das untersuchte Problem am besten geeignete einzusetzen. Für ein anderes Problem verwendete er wiederum die dafür adäquate Methode. Das machte für einen Laien schon den Vergleich der Arbeiten eines einzigen Autors schwierig, erst recht den von Arbeiten unterschiedlicher Autoren. Pople dagegen publizierte Rechnungen mit einer wohl definierten Methode nicht an einem, sondern an hundert Molekülen, und er legte auf den Vergleich mit den entsprechenden experimentellen Daten großen Wert. Eine wichtige Rolle spielte für ihn der Begriff einer Modellchemie,^[22] die gekennzeichnet ist durch ein bestimmtes

Von den semiempirischen Methoden...

Rechenverfahren (z. B. SCF) und einen wohldefinierten Basissatz (z. B. STO-3G oder 4-31G*). Für jede Modellchemie lagen Dokumentationen über ihre Zuverlässigkeit und die Grenzen ihrer Anwendbarkeit vor, basierend auf Vergleichen mit dem Experiment. Bei der Anwendung semiempirischer Methoden, die nur im Vergleich mit dem Experiment zu rechtfertigen sind, war dieses Verfahren ohnehin unumgänglich. Die mit dem Konzept der Modellchemie verbundene Standardisierung bedeutete einen deutlichen Verlust an Flexibilität, hatte aber den Vorteil, dass verschiedene Autoren an verschiedenen Orten und zu verschiedenen Zeiten miteinander konsistente Rechnungen machen konnten und dass jeder auf die bereits vorhandenen Rechnungen zurückgreifen konnte. Dieses Konzept wurde dadurch unterstützt, dass Pople die von ihm und seinen Mitarbeitern entwickelten Programme (Stichwort GAUSSIAN) zu fairen Bedingungen möglichen Benutzern zur Verfügung zu stellte und auch benutzerfreundlich gestaltete, während andere Verfasser von Programmen in dieser Hinsicht viel zurückhaltender waren. Es war Pople sicher bewusst, dass er damit gewissermaßen zum Marktführer wurde und auch dass er die Hoheit über die Ab-initio-Nomenklatur gewann.

Als Pople sich für Rechnungen unter Berücksichtigung der Elektronenkorrelation entschied^[23] (d. h. der Effekte, die man in der SCF-Näherung nicht erfasst), hätte es vielleicht nahe gelegen, hierbei auf die in Deutschland entwickelten und erfolgreich eingesetzten Methoden IEPA (independent electron pair approximation)^[24] und CEPA (coupled electron pair approximation)^[25,26] zurückzugreifen. Er

zog es aber vor, seine eigene Hierarchie von Näherungsverfahren zur Erfassung der Korrelation zu etablieren, in der IEPA und CEPA keinen Platz hatten. Im privaten Gespräch hat er viel später zugegeben, dass es vielleicht nicht ganz fair war, den Zusammenhang mit diesen älteren Verfahren ganz zu ignorieren.

Ähnlich wie die meisten Ab-initio-Theoretiker war auch Pople lange Zeit

skeptisch gegenüber den sogenannten Dichtefunktionalansätzen, jedenfalls denen vom Typ LDA (local-density approximation),^[27] die für chemische Probleme schlicht zu ungenau waren. Das änderte sich schlagartig, als A. Becke^[28] und J. Perdew^[29] Dichtefunktionale der zweiten Generation (mit Gradientenkorrekturen) vorschlugen, mit denen chemische Genauigkeit erreichbar war. Da zögerte ein Pragmatiker wie Pople nicht, in seinem Programmpaket auch Dichtefunktionale wie B3LYP verfügbar zu machen.^[30]

Ohne die Beiträge von J. A. Pople hätte die numerische Ab-initio-Quantenchemie aller Wahrscheinlichkeit nach nicht den unerwarteten Siegeszug angebetreten, der sie zu einem unverzichtbaren Werkzeug für so gut wie jeden Chemiker gemacht hat. Dabei war es besonders hilfreich, dass Pople kompetente Partner fand, die für eine Brücke zur „wirklichen“ Chemie sorgten. Hierbei muss man insbesondere P. von R. Schleyer erwähnen,^[31] der die Theorie u. a. dazu benutzte, ganze vom Experiment her unbekannte Bereiche der Chemie zu erschließen.

Es war durchaus folgerichtig und für niemanden überraschend, dass das Lebenswerk von John Pople mit dem Nobelpreis für Chemie 1998 gekrönt wurde.^[32] Mitpreisträger war Walter Kohn, womit gewürdigt werden sollte, dass die kurz zuvor in quantenchemische Programmpakete implementierten^[30] Dichtefunktionale^[28,29] ursprünglich auf ihn zurückgehen.^[27] Man sollte hieraus aber nicht den Schluss ziehen, dass der entscheidende Durchbruch der Ab-initio-Quantenchemie erst dadurch möglich geworden sei, dass sie sich gewissermaßen mit der Dichtefunktionaltheorie vereinigt hätte. Es ist eher so, dass der Dichtefunktional-Formalismus nur ein Steinchen (wenn

auch vielleicht ein besonders auffälliges) im reichhaltigen Mosaik der Ab-initio-Quantenchemie darstellt. Ein weiteres Steinchen war z. B. die Erfassung relativistischer Korrekturen.

Neben vielen anderen – die gewollt oder ungewollt im Hintergrund geblieben sind – verdanken wir insbesondere

J. A. Pople die Erfüllung des Traums, dass die Theoretische Chemie einen festen Platz innerhalb der Chemie gefunden hat. Es muss bei aller Freude darüber allerdings erlaubt sein zu fragen, ob wir uns wirklich erträumt haben,^[33] dass die Theorie in der Gestalt eines schwarzen Kastens auftritt und ähnlich eingesetzt wird wie z. B. ein Kernresonanzspektrometer.

Sir John, wie er sich in seinem letzten Lebensjahr nennen durfte, war ein liebenswürdiger Mensch und angenehmer Gesprächspartner. Er argumentierte sachlich, aber mit Witz. Anders als viele weniger berühmte Kollegen nahm er sich selbst nicht sonderlich wichtig. Ich mochte ihn.

... zur Ab-initio-Theorie und GAUSSIAN...

... bis zum Chemie-nobelpreis

- [1] J. A. Pople, H. C. Longuet-Higgins, *Mol. Phys.* **1958**, *1*, 372.
- [2] a) C. A. Coulson, H. C. Longuet-Higgins, *Proc. R. Soc. London Ser. A* **1947**, *191*, 39; b) C. A. Coulson, H. C. Longuet-Higgins, *Proc. R. Soc. London Ser. A* **1947**, *193*, 456.
- [3] H. C. Longuet-Higgins, *J. Chem. Phys.* **1950**, *18*, 275.
- [4] W. Kutzelnigg, *Einführung in die Theoretische Chemie*, Bd. 2., Verlag Chemie, Weinheim, **1978/1994**, Nachdruck **2002**.
- [5] H. C. Longuet-Higgins, R. P. Bell, *J. Chem. Soc.* **1943**, 250.
- [6] H. C. Longuet-Higgins, M. de V. Roberts, *Proc. R. Soc. London Ser. A* **1955**, *230*, 110.
- [7] H. C. Longuet-Higgins, E. W. Abrahamson, *J. Am. Chem. Soc.* **1965**, *87*, 2646.
- [8] G. Herzberg, H. C. Longuet-Higgins, *Discuss. Faraday Soc.* **1963**, *35*, 77.
- [9] H. C. Longuet-Higgins, *Mol. Phys.* **1963**, *6*, 445.
- [10] P. R. Bunker, *Molecular Symmetry and Spectroscopy*, Academic Press, New York, **1979**.
- [11] S. F. Boys, *Proc. R. Soc. London Ser. A* **1950**, *200*, 542.
- [12] a) H. C. Longuet-Higgins, *Nature* **1976**, *263*, 646; b) H. C. Longuet-Higgins, *Mental Processes: Studies in Cognitive Science*, MIT Press, Cambridge MA, **1987**.
- [13] H. C. Longuet-Higgins, *Faraday Discuss. Chem. Soc.* **1977**, *62*, 347.
- [14] J. A. Pople, W. G. Schneider, H. J. Bernstein, *High Resolution Nuclear Magnetic Resonance*, McGraw-Hill, New York, **1959**.
- [15] J. A. Pople, *Trans. Faraday Soc.* **1953**, *49*, 1375.
- [16] R. G. Pariser, R. G. Parr, *J. Chem. Phys.* **1953**, *21*, 466; b) R. G. Pariser, R. G. Parr, *J. Chem. Phys.* **1953**, *21*, 767.

- [17] R. Hoffmann, *J. Chem. Phys.* **1963**, *39*, 1397.
- [18] J. A. Pople, D. P. Santry, G. A. Segal, *J. Chem. Phys.* **1965**, *43*, 129.
- [19] J. A. Pople, D. L. Beveridge, *Approximate Molecular Orbital Theory*, McGraw-Hill, New York, **1970**
- [20] W. Thiel, *Adv. Chem. Phys.* **1996**, *93*, 703.
- [21] W. J. Hehre, R. F. Stewart, J. A. Pople, *J. Chem. Phys.* **1969**, *51*, 2657.
- [22] „Theoretical Models in Chemistry“: J. A. Pople in *Proceedings of the summer research conference on theoretical chemistry, structure and reactivity* (Hrsg.: D. W. Smith), Wiley, New York, **1973**.
- [23] J. S. Binkley, J. A. Pople, *Int. J. Quantum Chem.* **1975**, *9*, 229.
- [24] M. Jungen, R. Ahlrichs, *Theor. Chim. Acta* **1970**, *17*, 339.
- [25] W. Meyer, *Chem. Phys.* **1973**, *58*, 1017.
- [26] W. Kutzelnigg, *Modern Theoretical Chemistry, Vol. 3* (Hrsg.: H. F. Schaefer III), Plenum, New York, **1975**.
- [27] W. Kohn, L. S. Sham, *Phys. Rev. A* **1965**, *140*, 133; b) J. C. Slater, *Phys. Rev.* **1951**, *81*, 385.
- [28] A. D. Becke, *Phys. Rev. A* **1988**, *38*, 3098.
- [29] J. P. Perdew, W. Yue, *Phys. Rev. B* **1986**, *33*, 8800.
- [30] B. G. Johnson, P. M. W. Gill, J. A. Pople, *J. Chem. Phys.* **1989**, *98*, 5612.
- [31] W. J. Hehre, L. Radom, P. v. R. Schleyer, J. A. Pople, *Ab-initio Molecular Orbital Theory*, Wiley, New York, **1986**.
- [32] J. A. Pople, *Angew. Chem.* **1999**, *111*, 2014; *Angew. Chem. Int. Ed.* **1999**, *38*, 1894.
- [33] W. Kutzelnigg, *Theor. Chem. Acc.* **2000**, *103*, 182.

IUPAC-Empfehlungen auf Deutsch

Die *Angewandte Chemie* veröffentlicht seit dem Frühjahr 2002 Übersetzungen von Recommendations und Technical Reports der IUPAC, um die chemische Fachsprache im Deutschen zu fördern. Sauber definierte Begriffe

und klare Nomenklaturregeln bilden die Basis für eine gute Lehre und für eine Verständigung zwischen den Wissenschaftlern einer Disziplin, und sie sind für den Austausch zwischen Wissenschafts- und Fachsprache so-

wie Allgemeinsprache essenziell. Alle Übersetzungen werden von einem ausgewiesenen Experten (dem „Obmann“) geprüft, korrigiert und autorisiert. Folgende Übersetzungen sind bereits erschienen:

Glossar zur Kombinatorischen Chemie

Angew. Chem. **2002**, *114*, 893–906

Richtlinien für die Präsentation der Methoden bei der Publikation von Rechenergebnissen (Teil A und B)

Angew. Chem. **2002**, *114*, 1497–1499, 1500–1502

Nomenklatur metallorganischer Verbindungen der Übergangsmetalle

Angew. Chem. **2002**, *114*, 2043–2058

Zur Benennung von Verbindungen im Si-Al-O-N-System

Angew. Chem. **2002**, *114*, 2721–2723

Erweiterung und Revision des von-Baeyer-Systems zur Benennung polycyclischer Verbindungen

Angew. Chem. **2002**, *114*, 3423–3432

Erweiterung und Revision der Nomenklatur der Spiroverbindungen

Angew. Chem. **2002**, *114*, 4073–4089

Definitionen für Fachbegriffe im Bereich der Diffusion im festen Zustand

Angew. Chem. **2002**, *114*, 4765–4776

Selektivität in der Analytischen Chemie

Angew. Chem. **2003**, *115*, 125–128

Glossar zur Theoretischen Organischen Chemie

Angew. Chem. **2003**, *115*, 2248–2294

Richtlinien für die Wiedergabe von Pulssequenzen für die NMR-Spektroskopie in Lösung

Angew. Chem. **2003**, *115*, 3293–3301

Beschreibung der Zusammensetzung und Struktur geordneter mikro- und mesoporöser Materialien mit anorganischen Wirtssystemen

Angew. Chem. **2003**, *115*, 4688–4696

Klassifikation der rastersondenmikroskopischen Verfahren

Angew. Chem. **2003**, *115*, 5804–5820

Generische herkunftsbezogene Namen für Polymere

Angew. Chem. **2004**, *116*, 652–656

NMR-Nomenklatur: Kernspineigenschaften und Konventionen für die Angabe chemischer Verschiebungen

Angew. Chem. **2004**, *116*, 2070–2083