

Titelbild

Christian Ochsenfeld,* Jörg Kussmann und Felix Koziol

Ein echtes Puzzle ist die Zuordnung der NMR-Signale von Molekülen mit mehr als tausend Atomen. Abhilfe lässt sich durch die Ab-initio-Berechnung der Spektren schaffen: C. Ochsenfeld et al. stellen in ihrer Zuschrift auf S. 4585 ff. eine Methode vor, mit deren Hilfe bei einem geringeren Rechenaufwand (durch Verringerung der Dimension der Berechnung von kubisch auf linear) eine näherungsweise Lösung der Schrödinger-Gleichung gelingt.

