

In ihrem prägnanten Essay schlagen die drei Autoren vor, dass man zwei verschiedene Begriffe zur Charakterisierung der in Computerexperimenten vorhergesagten „Stabilität“ verwenden könnte: „viable“ und „fleeting“. Diese werden sicherlich Eingang in die theoretisch-chemische Literatur finden, und sie werden ferner Experimentatoren

helfen, die Qualität einer im Computerexperiment gefundenen Aussage besser einzuschätzen. Aus diesen Gründen habe ich die Veröffentlichung des Essays in der *Angewandten Chemie* unterstützt, um vor allem das Bewusstsein der Nicht-Fachleute hinsichtlich dieses sehr wichtigen Aspekts theoretischer Voraussagen zu schärfen, wobei ich aber allen

Lesern den Essay wärmstens als Lektüre empfehlen möchte.

Online veröffentlicht am 6. August 2008

-
- [1] R. Hoffmann, P. von R. Schleyer, H. F. Schaefer III, *Angew. Chem.* **2008**, *120*, DOI: 10.1002/ange.200801206; *Angew. Chem. Int. Ed.* **2008**, *47*, DOI: 10.1002/anie.200801206.

Computerstudien

DOI: 10.1002/ange.200802330

Attraktiv und überzeugend

F. Matthias Bickelhaupt*

Hoffmann, Schleyer und Schaefer^[1] sprechen ein sehr wichtiges Thema in der Rechenchemie an, das oft (wenn nicht meistens) nur ungenügend Aufmerksamkeit erhält, nämlich die Signifikanz berechneter Werte, nicht nur im technischen und methodologischen Sinn (Präzision, Genauigkeit) sondern auch im Sinne ihrer physikalischen und chemischen Bedeutung (Stabilität, realistisches Ziel, etc.).

Computerchemiker sind sich oftmals dieses Punktes bewusst, meistens jedoch nicht in genügend expliziter Form. Mir gefällt der Vorschlag der Autoren,^[1] ein Protokoll einzuführen für rechnergestützte Forschungsarbeiten, in denen neue Zielverbindungen zur Synthese postuliert werden. Dieses Protokoll ver-

langt z. B., dass überprüft werden muss, ob Moleküle wirklich ausreichend stabil sind bezüglich der verschiedenen, denkbaren Dissoziationsmoden und insbesondere ob sie ausreichend inert sind gegenüber einer Reihe anderer Verbindungen. Andererseits wird es nicht immer einfach sein, all diese Bedingungen zu erfüllen und ich glaube nicht, dass selbige ausnahmslos und streng erzwungen werden sollten. Nicht einmal die Autoren des hier besprochenen Essays^[1] haben diese Bedingungen immer erfüllt und dies hat meines Wissens nie zu Problemen geführt. Auch die Klassifizierung einer Zielverbindung als lebensfähig („viable“) gegenüber kurzlebig („fleeting“) ist sehr nützlich. Ein Protokoll könnte einhergehen mit einem Klassifizierungsschema, aus dem der Leser einfach ableiten kann, welche Aspekte der „Lebensfähigkeit“ der vorhergesagten Moleküle überprüft worden sind.

Die Autoren^[1] unterstreichen entsprechende Schwächen in der Experimentalchemie, wie z. B. die Genauigkeit von Röntgenstrukturen. Dieser Punkt könnte sogar noch etwas stärker betont werden. Experimentelle „Tatsachen“ sind behaftet mit vielen ernsthaften, in

der Praxis jedoch oft übersehenen Problemen, deren Ursprung sich in der Ungenauigkeit der verwendeten Techniken findet, oder auch in der Theorie und den Annahmen, die in die Interpretation der primären Daten einfließen.

Auch die Tatsache, dass rechnergestützte Forschungsarbeiten durch die Behandlung von Bindungskonzepten an Bedeutung gewinnen, könnte etwas stärker hervorgehoben werden. Meiner Erfahrung nach ist vielen Chemikern unklar, *weshalb* theoretische Arbeiten durch Bindungsanalysen und die Entwicklung von Modellen an Bedeutung gewinnen.

Schließlich halte ich es für wichtig, dass der attraktive und überzeugende Essay von Hoffmann, Schleyer und Schaefer^[1] seinen Weg zur Leserschaft der *Angewandten Chemie* findet.

Online veröffentlicht am 6. August 2008

[*] Dr. F. M. Bickelhaupt
Department of Theoretical Chemistry
and Amsterdam Center for Multiscale
Modeling,
Scheikundig Laboratorium
der Vrije Universiteit
De Boelelaan 1083, 1081 HV Amsterdam
(Niederlande)
Fax: (+31) 20-59-87629
E-mail: fm.bickelhaupt@few.vu.nl

-
- [1] R. Hoffmann, P. von R. Schleyer, H. F. Schaefer III, *Angew. Chem.* **2008**, *120*, DOI: 10.1002/ange.200801206; *Angew. Chem. Int. Ed.* **2008**, *47*, DOI: 10.1002/anie.200801206.