

Literatur zur Vorbereitung des Methodenblocks im AFP:

Quantenchemie

- o David Young: *Computational Chemistry: A Practical Guide for Applying Techniques to Real World Problems*, Wiley-VCH, Weinheim, **2001**.
- o Frank Jensen: *Introduction to Computational Chemistry*, 2nd Ed., Wiley-VCH, Weinheim, **2006**.
- o W. Koch, M. C. Holthausen: *A Chemist's Guide to Density Functional Theory*, 2nd Ed., Wiley-VCH, Weinheim, **2001**.
- o J. A. Pople, *Angew. Chem.* **1999**, 111, 2014.
- o R. Hoffmann, P.von R. Schleyer, H.F. Schaefer III, *Angew. Chem.* **2008**, 120, 7276.

Kristallographie:

- o W. Borchardt-Ott: *Kristallographie - eine Einführung für Naturwissenschaftler*, Springer, Berlin, 7. Aufl. **2009**.
- o U. Müller: *Anorganische Strukturchemie*, B. G. Teubner, Stuttgart, 6. Aufl. **2008**.
- o *International tables for crystallography, Vol. A: Space-group symmetry*, 5th Ed., Reidel, Dordrecht, **2002**. *)

Röntgendiffraktometrie:

- o W. Massa: *Kristallstrukturbestimmung*, B. G. Teubner, Stuttgart, 6. Aufl., **2009**.
- o H. Krischner, B. Koppelhuber-Bitschnau: *Röntgenstrukturanalyse und Rietveld methode - eine Einführung*, Vieweg, Braunschweig, 5. Aufl., **1994**.
- o R. West: *Solid State Chemistry and its Applications*, Wiley, Chichester, 1st Ed., **1995** (Reprint).
- o L. Smart, E. Moore: *Einführung in die Festkörperchemie*, Vieweg, Braunschweig/Wiesbaden, 1. Aufl., **1997**.

Schwingungsspektroskopie:

- o J. Weidlein, U. Müller, K. Dehnicke: *Schwingungsspektroskopie – eine Einführung*, 2. Aufl., Thieme Verlag, Stuttgart, **1988**.
- o Helmut Günzler, Hans-Ulrich Gremlich, *IR-Spektroskopie*, 4. Aufl., Wiley-VCH, Weinheim, **2003**.
- o Alois Fadini, Frank-Michael Schnepel, *Schwingungsspektroskopie: Methoden, Anwendungen*, Thieme Verlag, Stuttgart, **1985**.
- o Evelyn A. V. Ebsworth, David W. H. Rankin, Stephen Cradock, *Structural Methods in Inorganic Chemistry*, 2nd Ed., CRC Press, Boca Raton, **1994**.
- o K. Nakamoto: *Infrared and Raman Spectra of Inorganic and Coordination Compounds, Part A: Theory and Applications in Inorganic Chemistry*, 5th Ed., J. Wiley & Sons, New York, **1997**.
- o Manfred Hesse, Herbert Meier, Bernd Zeeh, *Spektroskopische Methoden in der Organischen Chemie*, 7. Aufl., Thieme Verlag, Stuttgart, **2005**,
- o J. Michael Hollas, *Modern Spectroscopy*, 4. Aufl., Wiley, Chichester, **2004**.