

# Inhaltsverzeichnis

I. Elektronen und Atomkerne . . . . .	1
1. Vom Versagen der „alltäglichen“ Vorstellungen . . . . .	1
2. Das Verhalten der Elektronen . . . . .	2
3. Die Heisenberg'sche Unschärferelation . . . . .	3
Betrachtungen zur Heisenberg'schen Unschärferelation . . . . .	6
II. Was können wir grundsätzlich über die Elektronenbewegungen wissen? . . . . .	9
1. Aufenthaltswahrscheinlichkeit . . . . .	9
Aufenthaltswahrscheinlichkeit bei mehreren Elektronen . . . . .	10
Der Elektronenspin (Eigendrehimpuls) . . . . .	12
Berücksichtigung der Atomkerne . . . . .	12
Der Bindungsabstand . . . . .	13
2. Die Elektronendichte $\rho$ . . . . .	13
Volumenelemente addieren . . . . .	15
Die $\gamma$ -Funktion . . . . .	16
Elektronendichte im n-Elektronensystem . . . . .	18
3. Stationäre und nichtstationäre Zustände . . . . .	18
Die Wellenfunktion $\psi$ . . . . .	21
Erweiterung auf mehrere Elektronen . . . . .	23
III. Das Periodensystem als Ausdruck des Elektronenverhaltens . . . . .	24
1. Die Quantenzahlen . . . . .	24
Knotenflächen und Knotenkugeln . . . . .	26
Orbitale . . . . .	27
2. Mehrelektronensysteme . . . . .	29
Aufbauprinzip und Elektronenkonfiguration . . . . .	31
Ionisierungsenergien . . . . .	34
Verbindung zum Periodensystem . . . . .	35
Das Pauli-Prinzip . . . . .	37
Bedeutung des Pauli-Prinzips . . . . .	38
Zur Darstellung der Gesamtelektronendichte . . . . .	41
3. Die Elektronegativitäten . . . . .	42
Valenzstrich-Struktur und Bindungsenergien . . . . .	46
Die Bindungsradien . . . . .	48

IV. Die „Anschaulichkeit“ der chemischen Bindung . . . . .	50
1. Ein sehr wichtiger Näherungsstandpunkt . . . . .	50
2. Die chemische Bindung . . . . .	54
3. Einige halbempirische Vorstellungen . . . . .	59
V. Eine Systematik der chemischen Bindung . . . . .	61
1. Die Molekülorbitale (MO) . . . . .	61
2. Lokalisierte Orbitale und Valenzstrich-Schema . . . . .	65
3. Die Näherung der Linearkombination von Atomorbitalen . . . . .	72
VI. Wie werden Elektronenverteilungen (Materiewellen) berechnet? . . . . .	76
Liste der häufiger verwendeten Symbole . . . . .	79
Sachverzeichnis . . . . .	81