

## **Inhalt**

### **Inhalt von Band 2 XI**

### **Verwendete Symbole XVII**

- 1. Klassisch-mechanische Behandlung von Atomen und Molekülen 1**
  - 1.1. Vorbemerkung 1
  - 1.2. Der Newtonsche und der Hamiltonsche Formalismus für die Bewegung eines Massenpunktes 2
  - 1.3. Die Hamilton-Funktion eines Moleküls 6
  - 1.4. Das Keplerproblem am Beispiel des H-Atoms 7
  - 1.5. Bewegungskonstanten – Der Drehimpuls 12
  - 1.6. Das Bohrsche Atommodell 15
  - Zusammenfassung zu Kap. 1 16
  
- 2. Einführung in die Quantenmechanik 19**
  - 2.1. Wellenfunktionen und Operatoren 19
  - 2.2. Lösungen einfacher Schrödingergleichungen 23
    - 2.2.1. Das Teilchen im eindimensionalen Kasten 23
    - 2.2.2. Das Teilchen im dreidimensionalen Kasten 26
  - 2.3. Erwartungswerte 29
  - 2.4. Vertauschbarkeit von Operatoren 32
  - 2.5. Der harmonische Oszillator 35
  - 2.6. Matrixelemente von Operatoren 40
  - 2.7. Der klassische Grenzfall und die Unschärferelation 41
  - Zusammenfassung zu Kap. 2 48
  
- 3. Quantentheorie des Drehimpulses 51**
  - 3.1. Vertauschbarkeit der Komponenten des Drehimpulsoperators mit dem Hamilton-Operator im Zentralfeld 51
  - 3.2. Vertauschungsrelation der Komponenten des Drehimpulsoperators untereinander – Einführung von  $\ell^2$  53
  - 3.3. Die gemeinsamen Eigenfunktionen von  $\ell_z$  und  $\ell^2$  im Eielektronenfall – Legendre-Polynome und Kugelfunktionen 54
  - 3.4. Ableitung der Eigenwerte des Quadrates des Drehimpulsoperators aus den Vertauschungsrelationen 58
  - 3.5. Der Elektronenspin 62
  - Zusammenfassung zu Kap. 3 67
  
- 4. Das Wasserstoffatom 69**
  - 4.1. Abtrennung der Schwerpunktsbewegung 69
  - 4.2. Atomare Einheiten 69
  - 4.3. Die Winkelabhängigkeit der Eigenfunktionen 70
  - 4.4. Lösung der radialen Schrödingergleichung 71
    - 4.4.1. Verhalten der Lösung für  $r \rightarrow \infty$  71
    - 4.4.2. Bestimmung der Koeffizienten von  $P(r)$  72

## VIII *Inhalt*

4.4.3. Abbruch von  $P(r)$  nach einer endlichen Zahl von Gliedern – Quantenzahlen 72

4.5. Reelle und komplexe Eigenfunktionen des H-Atoms 78

Zusammenfassung zu Kap. 4 80

### **5. Matrixdarstellung von Operatoren und Variationsprinzip 83**

5.1. Die Matrixform der Schrödingergleichung 83

5.2. Allgemeines zum Variationsprinzip 84

5.3. Energie-Erwartungswert berechnet mit genäherter Wellenfunktion als obere Schranke für die exakte Grundzustandsenergie

5.4. Äquivalenz zwischen Variationsprinzip und Schrödingergleichung 86

5.5. Die Eckartsche Ungleichung 87

5.6. Zwei Variationsrechnungen für den Grundzustand des H-Atoms 88

5.6.1. Exponentialfunktion als Variationsansatz 88

5.6.2. Gauß-Funktion als Variationsansatz 90

5.7. Lineare Variation – Das Ritzsche Verfahren 92

Zusammenfassung zu Kap. 5 94

### **6. Störungstheorie 97**

6.1. Vorbemerkung 97

6.2. Das Grundproblem der Störungstheorie 98

6.3. Taylor-Entwicklung der Energie in einem Spezialfall – Konvergenzradius der Entwicklung 99

6.4. Der Formalismus der Rayleigh-Schrödingerschen Störentwicklung 103

6.5. Störungstheorie 2. Ordnung 108

6.6. Störungstheorie für entartete Zustände 112

6.7. Störungstheorie ohne natürlichen Störparameter 114

Zusammenfassung zu Kap. 6 116

### **7. Elementare Theorie der Atome 117**

7.1. Atom-Orbitale 117

7.1.1. Der hypothetische Fall eines separierbaren Mehrelektronensystems 117

7.1.2. Die Slaterschen Regeln 120

7.1.3. Orbitalenergien und Gesamtenergie 123

7.2. Der Aufbau der Periodensystems der Elemente 123

Zusammenfassung zu Kap. 7 129

### **8. Zweielektronenatome – Singulett- und Triplett-Zustände 133**

8.1. Der Helium-Grundzustand 133

8.2. Permutation von Elektronenkoordinaten – Symmetrische und antisymmetrische Zustände 135

8.3. Der erste angeregte Zustand des Helium-Atoms 136

8.4. Ortho- und Para-Helium 139

8.5. Die Zweielektronen-Spinfunktionen – Singulett- und Triplett-Zustände 140

8.6. Das Pauli-Prinzip 144

Zusammenfassung zu Kap. 8 145

<b>9. Das Modell der unabhängigen Teilchen bei Mehrelektronenatomen</b>	147
9.1. Spinorbitale	147
9.2. Slater-Determinanten	147
9.2.1. Definition	147
9.2.2. Erwartungswerte, gebildet mit Slater-Determinanten	148
9.2.3. Elimination des Spins aus den Erwartungswerten	151
9.3. Abgeschlossene Schalen – Die Hartree-Fock-Näherung	153
Zusammenfassung zu Kap. 9	155
<b>10. Terme und Konfigurationen in der Theorie der Mehrelektronenatome</b>	157
10.1. Beispiele für Zustände, die durch die Angabe der Konfiguration nicht eindeutig gekennzeichnet sind	157
10.2. Gesamtdrehimpuls und Gesamtspin in Mehrelektronenatomen	160
10.3. Abzählschema zur Bestimmung der Terme zu einer Konfiguration	163
10.4. Die Dreiecksungleichung für die Kopplung von Drehimpulsen	164
10.5. Energien der verschiedenen Terme zu einer Konfiguration – Der Diagonalsummensatz	165
10.6. Einführung der Slater-Condon-Parameter	168
10.7. Energien der Terme einiger wichtiger Konfigurationen	172
10.8. Berechnung der Wellenfunktionen zu den Termen einer Konfiguration	175
10.9. Die Parität von atomaren Wellenfunktionen	178
Zusammenfassung zu Kap. 10	179
<b>11. Spin-Bahn-Wechselwirkung und Atome im Magnetfeld</b>	181
11.1. Spin-Bahn-Wechselwirkung für Einelektronenatome	181
11.2. Spin-Bahn-Wechselwirkung bei Mehrelektronenatomen – Die Russel-Saunders-Kopplung	185
11.3. Intermediäre Kopplung und $j-j$ -Kopplung	188
11.4. Atome im Magnetfeld	191
11.4.1. Klassische Hamilton-Funktion – Vektorpotential des Magnetfeldes	191
11.4.2. Der Hamilton-Operator für ein Atom im Magnetfeld	192
11.4.3. Anwendung der Störungstheorie	194
11.4.4. Der Diamagnetismus von Atomen in $^1S$ -Zuständen	195
11.4.5. Der Zeeman-Effekt	196
11.4.6. Die magnetische Suszeptibilität paramagnetischer Atome	197
Zusammenfassung zu Kap. 11	199
<b>12. Elektronen-Korrelation und Konfigurationswechselwirkung</b>	201
12.1. Die Korrelationsenergie	201
12.2. Die Korrelation der Elektronen im Raum	202
12.3. Konfigurationswechselwirkung	206
12.4. Die Elektronen-Korrelation im Helium-Grundzustand	207
12.5. Elektronenpaar-Korrelation in Atomen	210
Zusammenfassung zu Kap. 12	212
<b>Mathematischer Anhang</b>	
A 1. Vektoren	213
A 1.1. Definitionen	213

X *Inhalt*

A.1.2. Geometrische Deutung eines Vektors – Skalarprodukte	214
A 1.3. Linearkombinationen von Vektoren – Koordinatentransformation	216
A 1.4. Kovariante und kontravariante Komponenten eines Vektors	219
A 1.5. Vektorprodukte	220
A 2. Felder und Differentialoperatoren	220
A 3. Uneigentliche und mehrdimensionale Integrale	224
A 4. Krummlinige Koordinatensysteme, insbesondere sphärische Polarkoordinaten	227
A 5. Differentialgleichungen	234
A 5.1. Definitionen	234
A 5.2. Existenzsätze	235
A 5.3. Separierbare gewöhnliche Differentialgleichungen erster Ordnung – Beispiele für Lösungsmannigfaltigkeiten und Integrationskonstanten	235
A 5.4. Partielle Differentialgleichungen – Bedeutung der Randbedingungen	238
A 5.5. Methode der Separation der Variablen bei partiellen Differentialgleichungen	239
A.6. Lineare Räume	242
A 6.1. Definition eines linearen Raumes	242
A 6.2. Definition und Eigenschaften eines unitären Raumes	244
A 6.3. Orthogonale Funktionensysteme	247
A 6.4. Unendlich-dimensionale Räume – Der Hilbert-Raum	250
A 6.5. Operatoren	253
A 7. Matrizen	261
A 7.1. Allgemeines	261
A 7.2. Determinanten	267
A 7.3. Auflösen linearer Gleichungssysteme	271
A 7.4. Eigenwerte und Eigenvektoren	276
A 7.5. Eigenwert-Theorie hermitescher Matrizen	279
A 7.6. Funktionen hermitescher Matrizen	286
<b>Register</b>	<b>289</b>