

Inhalt

Teil I. Quantenmechanische Grundlagen

Vorwort zu Teil I XV

In Teil I 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 ℓ^2 53
 - 3.3. Die gemeinsamen Eigenfunktionen von ℓ_z und ℓ^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
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	85
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
9.	Das Modell der unabhängigen Teilchen bei Mehrelektronenatomen	147
9.1.	Spinorbitale	147
9.2.	Slater-Determinanten	147
9.2.1.	Definitionen	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
10.	Terme und Konfigurationen in der Theorie der Mehrelektronenatome	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
11.	Spin-Bahn-Wechselwirkung und Atome im Magnetfeld	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
12.	Elektronen-Korrelation und Konfigurationswechselwirkung	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

Mathematischer Anhang

- A 1. Vektoren 213
 - A 1.1. Definitionen 213
 - 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

Teil II: Die chemische Bindung

Vorwort zu Teil II der 2. Auflage XXV

Vorwort zu Teil II der 1. Auflage XXVI

In Teil II verwendete Symbole XXIX

- 1. Zur Geschichte der Theorie der chemischen Bindung 1**
 - 1.1. Entwicklung der klassischen Valenztheorie 1
 - 1.2. Theorie der chemischen Bindung auf quantenmechanischer Grundlage 2
 - 1.3. Ergänzungen 1993 6
- 2. Vorbemerkungen zur Quantentheorie von Molekülen 7**
 - 2.1. Allgemeines 7
 - 2.2. Die Abtrennung der Kernbewegung 7
- 3. Das H_2^+ -Molekül-Ion 13**
 - 3.1. Diskussion der exakten Potentialkurven und ihres Verhaltens für $R \rightarrow 0$ und $R \rightarrow \infty$ 13
 - 3.2. Die LCAO-Näherung 17
 - 3.3. Quasiklassische und Interferenzbeiträge zur chemischen Bindung 24
 - 3.4. Einführung eines variablen η . Der Virialsatz für Moleküle 27
 - 3.5. Die Rolle von kinetischer und potentieller Energie für das Zustandekommen der chemischen Bindung 33
 - 3.6. Das Hellmann-Feynman-Theorem 37
- 4. Das H_2 -Molekül 41**
 - 4.1. Die MO-LCAO-Näherung 41
 - 4.2. Die Links-Rechts-Korrelation 46
 - 4.3. Der Heitler-Londonsche Ansatz 50
 - 4.4. Qualitative Erfassung der Links-Rechts-Korrelation in der MO-Theorie 53
 - 4.5. Die natürliche Entwicklung der H_2 -Wellenfunktion 55
 - 4.6. Angeregte Zustände des H_2 59
- 5. Der quantenchemische Ausdruck für die Bindungsenergie eines beliebigen Moleküls in der MO-LCAO-Näherung und seine physikalische Interpretation 63**
 - 5.1. Überblick 63
 - 5.2. Die Energie eines Moleküls in der MO-LCAO-Näherung 65
 - 5.3. Trennung von quasiklassischen und Interferenzbeiträgen zur chemischen Bindung 66
 - 5.4. Einführung der Einelektronen-Matrixelemente α , γ , β 71
 - 5.5. Vorläufige Aufteilung der Energie in intra- und interatomare Beiträge 73
 - 5.6. Der MO-theoretische Valenzzustand 74
 - 5.7. Näherungsweise Berücksichtigung der Links-Rechts-Korrelation 76

5.8.	Abschließende Diskussion des Energieausdrucks	83
5.9.	Ergänzungen 1993	86
6.	Ableitung einiger quantenchemischer Näherungsmethoden	87
6.1.	Begründung einer Einelektronentheorie (mit Überlappung) für unpolare Moleküle	87
6.2.	Die Hückelsche Näherung	92
6.2.1.	Ableitung aus der Einelektronentheorie mit Überlappung	92
6.2.2.	Die Hückel-Näherung für Moleküle einer Atomsorte mit einem AO pro Atom. Die topologische Matrix oder Strukturmatrix	95
6.2.3.	Berücksichtigung der Überlappung in höherer Ordnung	98
6.2.4.	Störungstheorie im Rahmen der Hückel-Näherung	99
6.3.	Die Poplesche Näherung	104
6.4.	Über die zwei Arten von Einelektronenenergien	109
6.5.	Beschränkung auf Valenzelektronen	111
6.6.	Schlußbemerkungen zu Kapitel 6	114
7.	Polarität einer Bindung. Die Grenzfälle kovalenter und ionogener Bindung	115
7.1.	Polarität einer Bindung im Rahmen der Hückelschen Näherung	115
7.2.	Die Ionenbindung. Ionisationspotential und Elektronenaffinität	118
7.3.	Bindungen mittlerer Polarität	122
7.4.	Die Elektronegativität	123
7.5.	Potentialkurven kovalenter und ionogener Moleküle. Die Nichtüberkreuzungsregel	126
7.6.	Die chemische Bindung in polaren Molekülen	129
8.	Zweiatomige Moleküle mit mehr als zwei Elektronen	131
8.1.	MO-Konfigurationen der homonuklearen zweiatomigen Moleküle der Atome der zweiten Periode	131
8.2.	Verschiedene Terme zur gleichen MO-Konfiguration	134
8.3.	Korrelationsdiagramme	139
8.4.	Die Abstoßung von abgeschlossenen Schalen am Beispiel des He ₂ -Moleküls	143
8.5.	Die Alkali-Moleküle und ihre Ionen	147
8.6.	Die Rolle der Elektronenkorrelation für die Bindung zweiatomiger Moleküle	149
8.7.	Die Einelektronenenergien in zweiatomigen Molekülen	151
8.8.	Heteronukleare zweiatomige Moleküle - Das Isosterieprinzip	153
8.9.	Schlußbemerkungen zu den zweiatomigen Molekülen	155
9.	Beschreibung mehratomiger Moleküle durch Mehrzentrenorbitale	157
9.1.	Mehrzentrenbindungen — Das H ₃ ⁺	157
9.2.	MO-Theorie und Symmetrie in AB _n -Molekülen	161
9.2.1.	Symmetrie AO's am Beispiel des H ₂ O	161
9.2.2.	AB ₂ -Moleküle vom Typ des OF ₂ und des O ₃	166
9.2.3.	Allgemeine AB _n und AB _n C _m -Strukturen	171
9.3.	Die Walshschen Regeln und die Geometrie von Molekülen	173
9.3.1.	Einleitung und AH ₂ -Moleküle	173

- 9.3.2. AH_3 -Moleküle 179
- 9.3.3. AB_2 -Moleküle 182
- 9.3.4. AB_3 -Moleküle 184
- 9.3.5. Zur quantenmechanischen Rechtfertigung der Walshschen Regeln 185
- 9.4. Ergänzungen 1993 197

- 10. Lokalisierte Zweizentrenbindungen 199**
 - 10.1. Vorbemerkung 199
 - 10.2. Äquivalente Molekülorbitale 200
 - 10.2.1. Invarianz einer Slater-Determinante bez. unitärer Transformation der besetzten Orbitale 200
 - 10.2.2. Äquivalente MO's beim BeH_2 -Molekül 201
 - 10.2.3. Gruppentheoretische Definition der äquivalenten Orbitale und Formulierung der Hundschen Lokalisierungsbedingung für AB_n -Moleküle 204
 - 10.2.4. Erweiterung des Begriffs der äquivalenten MO's auf Fälle, wo sie durch die Symmetrie nicht eindeutig bestimmt sind 212
 - 10.3. Beispiele für Moleküle mit lokalisierbaren und mit nicht lokalisierbaren Bindungen 213
 - 10.4. Wertigkeit, Oktettregel, Elektronenmangel und Elektronenüberschuß. Freie Elektronenpaare 216
 - 10.5. Lokalisierte Bindungen im Rahmen der HMO-Näherung 219
 - 10.5.1. Vorbemerkung 219
 - 10.5.2. Die HMO-Näherung für ein lineares AH_2 -Molekül mit 4 Valenzelektronen 220
 - 10.5.3. Hybridisierungsbedingung und Lokalisierung 226
 - 10.5.4. Die Hückel-Matrix in der Basis von Hybridorbitalen 229
 - 10.5.5. Lokalisierung und Hybridisierung bei trigonalen ebenen AH_3 -Molekülen mit 6 Valenzelektronen 233
 - 10.5.6. Lokalisierung und Hybridisierung bei tetraedrischen AH_4 -Molekülen mit 8 Valenzelektronen 237
 - 10.6. Beschreibung von Bindungen durch MO's, gebildet aus Hybrid-AO's 239
 - 10.6.1. Bindungsenergie zwischen Hybrid-AO's in der HMO-Näherung. Das Prinzip der maximalen Überlappung 239
 - 10.6.2. Hybridisierung und Geometrie 246
 - 10.7. Ionisationspotentiale von Verbindungen mit lokalisierten Bindungen 248
 - 10.8. Lokalisierung und Elektronenkorrelation 253
 - 10.9. Abschließende Bemerkungen zur Lokalisierung von Bindungen und zur Hybridisierung 256
 - 10.10. Ergänzungen zu lokalisierten MO's und Hybrid-AO's 257

- 11. π -Elektronensysteme 259**
 - 11.1. Einführung in den Begriff π -Elektronensysteme 259
 - 11.2. Die Hückelsche Näherung für die π -Elektronensysteme 261
 - 11.3. Einfache Beispiele 264
 - 11.4. Bindungs- und Ladungsordnungen 267
 - 11.5. Die Hückel-MO's linearer Polyene und Polymethine 269
 - 11.5.1. Ableitung der Orbitalenergien 269
 - 11.5.2. Gesamt- π -Elektronenenergien und Resonanzenergien 271

- 11.5.3. AO-Koeffizienten der MO's 273
- 11.5.4. Einige Beispiele 273
- 11.5.5. Graphische Darstellung der MO-Energien 275
- 11.5.6. Die Frequenz des längstwelligen Elektronenübergangs 275
- 11.6. Die Hückel-MO's ringförmiger Polyene (Annulene) und die Hückelsche $(4N + 2)$ -Regel 277
 - 11.6.1. Ableitung der Eigenvektoren und Eigenwerte der Strukturmatrix 277
 - 11.6.2. Graphische Darstellung der MO-Energien und Beispiele 280
 - 11.6.3. Hückelsche und Anti-Hückelsche Ringpolyene 283
 - 11.6.4. Komplexe und reelle Eigenvektoren 285
 - 11.6.5. Möbiussche Kohlenwasserstoffe 288
- 11.7. Polyacene und Radialene 291
- 11.8. Alternierende und nicht-alternierende Kohlenwasserstoffe 295
- 11.9. Ungeradzahlige alternierende Kohlenwasserstoffe. Die Methode von Longuet-Higgins 298
- 11.10. Heteroatome. Störungstheorie 302
 - 11.10.1. Heteroatomparameter 302
 - 11.10.2. Erste und zweite Ableitungen der Orbitalenergien und der Gesamtenergie nach den α 's und β 's 303
 - 11.10.3. Pyridin als „gestörtes“ Benzol 304
 - 11.10.4. Störungstheoretische Behandlung einer zusätzlichen π -Bindung 306
- 11.11. Bindungsalternierung 308
- 11.12. Spektren von π -Elektronensystemen im sichtbaren und ultravioletten Spektralbereich 318
- 11.13. Konjugation und Hyperkonjugation 328
- 11.14. π -Elektronensysteme der Anorganischen Chemie 331
- 11.15. Verbindungen mit zwei zueinander senkrechten π -Elektronensystemen 334

- 12. Elektronenmangelverbindungen 337**
 - 12.1. Einleitung 337
 - 12.2. Das B_2H_6 -Molekül 338
 - 12.3. Die Oligomeren und Polymeren des BeH_2 341
 - 12.4. Die polyedrischen Borhydride 343
 - 12.5. Nichtklassische Carboniumionen 347
 - 12.6. Andere Elektronenmangelverbindungen 351
 - 12.7. Die metallische Bindung 352
 - 12.8. Ergänzungen zu den Elektronenmangelverbindungen 360

- 13. Elektronenüberschußverbindungen und das Problem der Oktettaufweitung bei Hauptgruppenelementen 361**
 - 13.1. 4-Elektronen-3-Zentren-Bindungen 361
 - 13.2. Wasserstoff-Brückenbindungen 364
 - 13.3. Donor-Akzeptor-Komplexe 373
 - 13.4. Edelgasfluoride und verwandte Verbindungen 375
 - 13.4.1. Beschreibung des XeF_2 und des KrF_2 durch eine 4-Elektronen-3-Zentren-Bindung 375
 - 13.4.2. Die Rolle der d -AOs 376

- 13.4.3. Die Bedeutung des Ionisationspotentials des Zentralatoms 377
- 13.4.4. Höhere Fluoride der Edelgase und anderer Elemente 378
- 13.4.5. Polyhalogenid-Anionen 380
- 13.4.6. Schlußbemerkung zu den durch 4-Elektronen-3-Zentren-Bindungen beschreibbaren Verbindungen 383
- 13.5. Edelgasoxide und verwandte Verbindungen 384
- 13.5.1. Semipolare Bindungen und ihre Stabilisierung durch Rückbindung 384
- 13.5.2. Bindungsausgleich zwischen „echten“ Doppelbindungen und semipolaren Bindungen 387
- 13.6. Nicht durch Dreizentrenbindungen beschreibbare Elektronenüberschußverbindungen 389
- 13.6.1. AB_6 -Moleküle 390
- 13.6.2. AB_5 -Moleküle 392
- 13.6.3. AB_4 - und AB_3 -Moleküle 396
- 13.7. Lokalisierte Bindungen und Geometrie von Elektronenüberschußverbindungen 402
- 13.8. Schlußbemerkung zu den Verbindungen der Hauptgruppenelemente 405
- 14. Verbindungen der Übergangselemente 407**
- 14.1. Vorbemerkungen 407
- 14.2. Das elektrostatische Kristallfeldmodell und seine Anwendung auf d^1 -Systeme 408
- 14.2.1. Der Grundgedanke des Kristallfeldmodells 408
- 14.2.2. d^1 -Systeme. Symmetriangepaßte d -AO's. Aufspaltung in Feldern verschiedener Symmetrie 410
- 14.2.3. Das Ligandenfeldpotential und sein Aufbau aus Beiträgen der einzelnen Liganden 413
- 14.2.4. Plausibilitätsbetrachtung zur energetischen Reihenfolge des t_{2g} und e_g -Niveaus im Oktaederfeld 417
- 14.2.5. Empirische Bestimmung der Ligandenfeldstärke 418
- 14.2.6. Zusammenhang der Ligandenfeldstärken in Oktaeder-, Tetraeder- und Würfelkomplexen 418
- 14.3. d^0 -Komplexe. Der Lückensatz 419
- 14.4. Die spektrochemische Reihe 420
- 14.5. d^2 -Komplexe im „schwachen“ Feld. Termwechselwirkung 423
- 14.6. Die Näherung des starken Feldes 427
- 14.7. Die nephelauxetische Reihe 430
- 14.8. Die Tanabe-Sugano-Diagramme. Komplexe mit hohem und niedrigem Spin 432
- 14.9. Der Modellcharakter der Ligandenfeldtheorie 436
- 14.10. LCAO-MO's eines Oktaederkomplexes 438
- 14.11. Vergleich MO-Theorie der Komplexe - Ligandenfeldtheorie 441
- 14.12. Zur Frage lokalisierter Metall-Ligand-Bindungen 445
- 14.13. Komplexe mit besonders hoher Ligandenfeldstärke, „Rückbindung“ und 18-Valenzelektronenregel. Die Metallcarbonyle 445
- 14.14. Koordinationszahlen und Geometrie von MX_n -Komplexen 450
- 14.15. Sandwich-Komplexe 454
- 14.16. Komplexe mit hoher Oxidationszahl des Zentral-Ions 457

XIV *Inhalt*

- 14.17. Spektren von Komplexen 458
- 14.18. Spin-Bahn-Wechselwirkung in Komplexen 461
- 14.18.1. Rekapitulation der Spin-Bahn-Wechselwirkung in Atomen 461
- 14.18.2. Spin-Bahn-Wechselwirkung bei d^1 -Systemen 463
- 14.18.3. Spin-Bahn-Wechselwirkung bei d^n -Systemen 466
- 14.18.4. Vergleich von $3d^n$ -, $4d^n$ -, $5d^n$ -, $4f^n$ - und $5f^n$ -Komplexen 467

- 15. Zwischenmolekulare Kräfte 469**
- 15.1. Abgrenzung der zwischenmolekularen Kräfte gegenüber der chemischen Bindung 469
- 15.2. Die klassisch-elektrostatische Wechselwirkung zwischen Molekülen. Die Multipolentwicklung 470
- 15.3. Quantenmechanische Formulierung der zwischenmolekularen Kräfte 477
- 15.4. Induktion 481
- 15.5. Dispersion 484
- 15.6. Resonanz 486
- 15.7. Kräfte bei sehr großen Abständen 489
- 15.8. Zwischenmolekulare Kräfte bei mittleren Abständen 490

Anhang

- A 1. Komplexe Einheitswurzeln 491
- A 2. Darstellungen von Symmetriegruppen 493
- A 2.1. Symmetrioperationen und Symmetriegruppen 493
- A 2.2. Die Symmetriegruppen von Molekülen 495
- A 2.3. Symmetrie und Quantenmechanik, Darstellungen einer Gruppe 496
- A 2.4. Reduzible und irreduzible Darstellungen 501
- A 2.5. Irreduzible Darstellungen von abelschen Gruppen 503
- A 2.6. Klassen von Symmetrieelementen. Charaktere 508
- A 2.7. Symmetrierniedrigung 512
- A 2.8. Direkte Produkte von Darstellungen 514
- A 2.9. Gruppenalgebra 515
- A 2.10. Die Gruppe $SU(2)$ und die Doppelgruppen 519
- A 3. Methoden der ab-initio-Quantenchemie 526
- A 3.1. Allgemeine Bemerkungen 526
- A 3.2. Basissätze 527
- A 3.3. Die Hartree-Fock (self-consistent field, SCF)-Näherung 531
- A 3.4. Die Methode der Konfigurationswechselwirkung und verwandte Verfahren 535
- A 3.5. Weniger konventionelle Methoden zur Erfassung der Elektronenkorrelation 540
- A 3.6. Berechnung der Eigenschaften von Molekülen 548
- A 3.7. Populationsanalyse 553
- A 3.8. Fortschritte seit ca. 1978 558

Namensregister für Teil II R 1

Sachregister für die Teile I und II R 8