

Inhalt

1	Warum Quantenchemie?	1
2	Ältere Quantentheorie	5
2.1	Die Bohrschen Postulate	5
2.2	Anwendung der Bohrschen Postulate auf das Wasserstoffatom	9
2.2.1	Berechnung der Energiezustände von Kreisbahnen	9
2.2.2	Rydberg-Balmer-Formel	14
2.3	Welle-Teilchen-Dualismus	15
3	Grundlagen der Quanten-(Wellen-)mechanik	19
3.1	Die Postulate der Quantenmechanik	21
3.2	Eigenwerte und Eigenfunktionen	26
3.2.1	Die zeitunabhängige Schrödingergleichung	27
3.2.2	Funktionsräume	29
3.2.3	Entartung	31
3.2.4	Orthogonalität und Orthogonalisierung	32
3.2.5	Vertauschung von Operatoren und Nichtkombinationsprinzip	34
3.2.6	Gemeinsame Eigenfunktionen mehrerer Operatoren	35
3.3	Drehimpulsoperator	39
4	Einkörperprobleme	45
4.1	Teilchen im Kasten	45
4.2	Teilchen im Coulombfeld (Keplerproblem)	50
4.3	Harmonischer Oszillator	59
4.4	Mehrdimensionale Schwingungsbewegungen	64
5	Näherungsverfahren	69
5.1	Störungsrechnung	70
5.2	Variationsrechnung	77
6	Elektronenspin	83

7	Mehrelektronensysteme	89
7.1	Pauliprinzip	91
7.2	Slater-Theorie der Atome	94
7.3	Hartree-Fock-(SCF-)Verfahren	105
7.4	Ab-initio-Rechnungen	113
8	Quantenmechanik einfacher Moleküle	125
8.1	Separation von Elektronen- und Kernbewegung	126
8.2	Wasserstoffmolekül-Ion H_2^+	128
8.3	Wasserstoffmolekül H_2	140
9	Molekulare Näherungsansätze	149
9.1	Valenzbindungs-(VB-)Theorie, Hybridisierung	149
9.2	Molekülorbital-(MO-)Theorie	164
9.3	MO-LCAO-Theorie kleiner Moleküle	171
9.4	Äquivalenz von VB- und MO-Theorie	192
10	Theorie der π -Elektronensysteme	197
10.1	σ - π -Separation	198
10.2	Hückel-(HMO-)Theorie	201
10.3	π -SCF-Theorie nach Pariser-Parr-Pople (PPP)	218
11	Semiempirische Verfahren mit allen Valenzelektronen	223
11.1	Erweiterte Hückel-Theorie (EHT)	224
11.2	Semiempirische SCF-Verfahren	227
11.2.1	CNDO-Verfahren	229
11.2.2	INDO- und MINDO-Näherung	235
11.2.3	NDDO- und MNDO-Methode	237
12	Ligandenfeld-Theorie	241
12.1	MO-LCAO-Beschreibung	242
12.2	Angular-Overlap-Modell (AOM)	253
12.3	Elektrostatisches Feld-Modell	261
12.4	Dynamisches Ligandenfeld, vibronische Kopplung	272
	Sachregister	287