

# I N H A L T

VORWORT		3
ANLEITUNG		5
KAPITEL 1: EINLEITENDE BEMERKUNGEN ÜBER DIE THEORETISCHEN GRUNDLAGEN DER CHEMIE		
1.1	Was dürfen wir von einer guten naturwissenschaftlichen Theorie erwarten?	11
1.2	Die Grundpfeiler der theoretischen Chemie.	14
1.3#	Ist die Quantenmechanik paradox?	17
KAPITEL 2: EINFÜHRUNG UND VORSCHAU		
2.1	Warum eine Vorschau?	21
2.2	Warum eine neue Bewegungslehre?	22
2.3	Wie errät man die Kinematik der Quantenmechanik?	23
2.4	Was ist der Spin?	24
2.5	Was ist ein System?	27
2.6	Was ist ein Zustand?	28
2.7	Wie entwickelt sich ein Zustand im Laufe der Zeit?	29
2.8	Was sind Observable?	31
2.9	Wie misst man Observable?	32
2.10	Was ist die Schrödingerdarstellung?	34
2.11#	Wie komponiert man Quantensysteme?	37
2.12	Was ist das Pauliprinzip?	39
2.13	Moral von der Geschichte.	41
KAPITEL 3: PRINZIPIEN DER QUANTENMECHANIK		
3.1	Die Algebra der Messungen	
3.1.1	Über den grundlegenden Unterschied zwischen der klassischen Physik und der Quantenphysik.	42
3.1.2#	Das Eddingtonsche Löwensieb.	43
3.1.3#	Selektive Messungen und erschöpfende Klassifikationen.	45
3.1.4	Nichtkompatible Eigenschaften.	48
3.1.5#	Matrixdarstellungen von endlichdimensionalen Systemen.	50
3.1.6#	Der Zustand eines Systems.	53
3.1.7#	Der Hilbertraum der Zustandsvektoren.	54
3.1.8#	Die algebraische Struktur der Quantenmechanik.	59
3.1.9#	Quantenmechanische Übergangswahrscheinlichkeit.	66
3.1.10#	Quantenmechanische Erwartungswerte.	71
3.1.11#	Weiterführende Literatur.	74

3.2	Quantenkinematik	
3.2.1	Welche Kinematik ist relevant für die Chemie?	75
3.2.2	Allgemeine Formulierung des Korrespondenzrezeptes.	80
3.2.3	Symmetrien und Erhaltungssätze.	85
3.2.4	Der Drehimpuls in der Quantenmechanik.	86
3.2.5	Physikalische Eigenschaften des Drehimpulses.	90
3.2.6	Eigenwertprobleme von Drehimpulsoperatoren.	93
3.2.7	Eigenwertprobleme spezieller Drehimpulsoperatoren.	96
3.2.8	Einfache Beispiele für die Bedeutung des Drehimpulses.	103
3.2.9	Weitere Übungsaufgaben.	114
3.3	Mehrteilchensysteme	
3.3.1	Quantenmechanische Elementarsysteme.	116
3.3.2	Bornsche Wahrscheinlichkeitsinterpretation.	117
3.3.3	Identische Teilchen.	120
3.4	Klassische Observable und Superauswahlregeln	
3.4.1	Klassische Observable in der Chemie.	124
3.4.2 <sup>#</sup>	Inkohärente Superpositionen und Superauswahlregeln.	126
3.4.3 <sup>#</sup>	Fermionen und Bosonen.	129
3.4.4 <sup>##</sup>	Masse und Teilchenzahl.	133
3.5	Schrödingergleichung und Variationsprinzip	
3.5.1	Die Energie-Zeit Unschärfe-Relation.	136
3.5.2	Stationäre Zustände.	137
3.5.3	Einige mathematische Eigenschaften der Lösungen der zeitunabhängigen Schrödingergleichung.	139
3.5.4	Variationsprinzip für den Grundzustand.	141
3.5.5	Das Ritz-Verfahren.	143
3.5.6	Weitere Übungsaufgaben.	146

## KAPITEL 4: MOLEKÜLSTRUKTUR

4.1	Molekeln als hierarchische Systeme	
4.1.1	Der historische Ansatz von Born und Oppenheimer.	147
4.1.2	Die Erzeugung qualitativ neuer Eigenschaften.	149
4.1.3	Hierarchische Systeme.	150
4.2	Adiabatische Beschreibung von Molekeln	
4.2.1	Die Trennung von Kern- und Elektronenbewegung nach Born und Oppenheimer.	153
4.2.2	Die Born-Oppenheimer-Hyperfläche.	156

4.3	Zweikernige Molekeln	
4.3.1	Die Elektronenstruktur der einfachsten Molekel.	160
4.3.2	Die Separation der Kernbewegung zweikerniger Molekeln.	164
4.3.3	Die Schwerpunktsbewegung.	168
4.3.4	Die interne Kernbewegung zweikerniger Molekeln.	170
4.3.5	Spektren zweikerniger Molekeln.	178
4.4	Mehrkernige Molekeln	
4.4.1	Molekeln und Übergangszustände.	186
4.4.2	Normalkoordinaten.	191
4.4.3 <sup>#</sup>	Die Molekülstruktur wird durch klassische Observable beschrieben.	195
4.5	Adiabatische chemische Reaktionen	
4.5.1	Reaktionskoordinaten	198
4.5.2	Adiabatische Reaktionen.	201

## KAPITEL 5: ELEKTRONISCHE STRUKTUR MOLEKULARER SYSTEME

5.1	Orbitalmethoden der Quantenchemie	
5.1.1	Modelle mit effektiven Wechselwirkungen.	206
5.1.2	Beispiel: Das SCF-Modell des Heliums.	209
5.1.3	Orbitale und Geminale.	212
5.1.4	Slaterdeterminanten.	214
5.1.5	Die Struktur von Mehrelektronenobservablen.	217
5.1.6	Das Modell der unabhängigen Teilchen: Die Hartree-Fock-Methode.	220
5.1.7	Lokalisierte Molekülorbitale.	225
5.1.8	Das Modell der individuellen Teilchen: Hartree-Quasiteilchen.	229
5.1.9 <sup>#</sup>	Reduzierte Dichteoperatoren.	234
5.2	Atome	
5.2.1	Das atomare Kepler-Problem.	244
5.2.2	Das Zentralfeldmodell für Mehrelektronenatome.	247
5.2.3	Wie addiert man Drehimpulse?	251
5.2.4	Termsymbole und Termenergien.	254
5.3	Fakten und Zahlen: Die Geschichte des Wasserstoff-Moleküls	
5.3.1	"Chemische Bindung".	259
5.3.2	Die empirische Richtigkeit der molekularen Quantenmechanik.	263
5.3.3	Moral von der Geschichte.	270

5.4	Numerische Ab-initio-Quantenchemie	
5.4.1 <sup>#</sup>	Die Roothaan-Gleichung.	272
5.4.2 <sup>#</sup>	Die Wahl der Basis.	277
5.4.3	Einige Anwendungen des Hartree-Fock-Roothaan-Verfahrens.	281
5.4.4 <sup>#</sup>	Anmerkung zur Elektronenkorrelation.	284
5.5	Semiempirische Methoden	
5.5.1	Modelle.	289
5.5.2	Zur Systematik semiempirischer Modelle.	292
5.5.3 <sup>#</sup>	Bemerkung zu den approximativen semiempirischen Verfahren.	295
5.5.4	Das Hückel-Modell.	296
5.5.5	Die Semiempirik zwischen Einzelmolekülen und Stoffklassen.	302

## KAPITEL 6: EPILOG

6.1	Was haben wir gelernt?	306
6.2	Was haben wir zu bedenken?	309
6.3	Was haben wir nicht behandelt?	311
6.4	An die junge Generation.	313
6.5	Offene Probleme und Ausblick.	317

## KAPITEL 7: ANHÄNGE

7.1	Mathematische Hilfsmittel	
7.1.1	Koordinatensysteme.	320
7.1.2	Der reelle n-dimensionale Vektorraum $\mathbb{R}^n$ .	323
7.1.3	Komplexe Vektorräume mit innerem Produkt.	325
7.1.4	Matrizen und Determinanten.	327
7.1.5	Die Deltafunktion.	331
7.1.6	Orthogonale Polynome.	334
7.2	Physikalische Masssysteme	
7.2.1	SI-Einheiten.	339
7.2.2	Atomare Einheiten.	341
7.3	Lösungen der Aufgaben	
7.3.1	Erste Hinweise*.	344
7.3.2	Zweite Hinweise**.	354
7.3.3	Dritte Hinweise***.	361
7.3.4	Lösungen.	364