

Inhaltsverzeichnis

0.	<u>BEMERKUNGEN UEBER DIE THEORETISCHEN GRUNDLAGEN DER CHEMIE</u>	
0.1.	Historische Entwicklung	1
0.2.	Grundpfeiler der theoretischen Chemie	1
0.3.	Die moderne Chemie hat erste Prinzipien	2
0.4.	Warnung	3
1.	<u>PRINZIPIEN DER QUANTENCHEMIE</u>	
1.1.	Mikroskopische Messungen und Wechselwirkungen	4
1.2.	Postulate der molekularen Quantenmechanik	6
1.3.	Born'sche Wahrscheinlichkeitsinterpretation	18
1.4.	Schrödingergleichung für Molekeln	20
1.5.	Variationsprinzip	26
1.6.	Entwicklung von Zustandsfunktionen und Slaterdeterminanten	32
1.7.	Hartree-Fock SCF-Methode	35
2.	<u>ATOME</u>	
2.1.	Vorbemerkung: Was ist ein Atom?	38
2.2.	Drehimpuls	
2.2.0.	Was ist der Drehimpuls?	38
2.2.1.	Wie misst man den Drehimpuls?	39
2.2.2.	Vertauschungsrelationen für den Drehimpuls	42
2.2.3.	Das Eigenwertproblem des Bahndrehimpulses	45
2.2.4.	Das Eigenwertproblem des Gesamtdrehimpulses	47
2.2.5.	Elektronenspin	48
2.2.6.	Komposition von Spindrehimpulsen	50
2.2.7.	Komposition von Bahndrehimpulsen und Gesamtdrehimpulsen	53
2.3.	Elektronenkonfiguration der Atome	
2.3.1.	Idee	54
2.3.2.	Die L-S - Kopplung (Russel-Saunders-Kopplung)	55

2.3.3.	Quantenzahlen der Einzelelektronen, SCF-Orbitale eines Atoms	57
2.3.4.	Pauli-Prinzip in der Formulierung von 1925	60
2.3.5.	Empirische Regeln zur Ermittlung des vollständigen Termsymbols für den Grundzustand der Atome und Atomionen	61
3.	<u>WASSERSTOFFAEHNLICHE ATOME</u>	
3.1.	Separation von Kern- und Elektronenbewegung	63
3.2.	Schwerpunktsbewegung	67
3.3.	H-ähnliche Atome als 1-Zentren/1-Elektronen - Problem	68
3.4.	s-Zustände des wasserstoffähnlichen Atoms	70
3.5.	p-Zustände des wasserstoffähnlichen Atoms	75
3.6.	Höhere Orbitale	80
3.7.	Bildliche Darstellung einiger Zustände von wasserstoff- ähnlichen Atomen	81
4.	<u>DAS WASSERSTOFFMOLEKUELION H_2^+</u>	
4.1.	Experimentelle Fakten	84
4.2.	H_2^+ in der Born-Oppenheimer-Approximation	85
4.3.	Einfachste LCAO-MO-Approximation	86
4.4.	Non-LCAO-Ansatz	89
4.5.	Diskussion der Resonanztheorie	90
5.	<u>DAS WASSERSTOFFMOLEKUEL H_2</u>	
5.1.	H_2 als 2-Zentren/2-Elektronen - Problem	93
5.2.	Ueberblick über einige Methoden der numerischen Quantenchemie am Beispiel H_2	
5.2.1.	Spin-Valenz-Methode (Valence-Bond-Theory)	96
5.2.2.	MO-Theorien	97
5.2.3.	Methode der Konfigurationswechselwirkung	99
5.2.4.	Spezialmethoden für He und H_2	100
5.2.5.	Geminal-Methoden	101
5.2.6.	Clusterentwicklung der Zustandsfunktion	101

6. DIE BORN-OPPENHEIMER HYPERFLAECHE

6.0. Vorbemerkungen	103
6.1. Die Born-Oppenheimer-Approximation Nullter Näherung	103
6.2. Was ist eine Molekel? Stabilitätskriterien	107
6.3. Uebergangszustände, adiabatische chemische Reaktionen	109
6.4. Zusammenfassung. Praktisches Vorgehen	110

Anhang M: NOTATION UND MATHEMATISCHE HILFSMITTEL

1. Ortsvektor, Skalarfeld, Vektorfeld	M 1
2. Kartesische Koordinaten	M 1
3. Kugelkoordinaten	M 3
4. Skalarprodukt, Hilbertraum, Operatoren	
4.1. Skalarprodukt im 3-dimensionalen Raum	M 5
4.2. Skalarprodukt im n-dimensionalen Raum	M 6
4.3. Skalarprodukt für Funktionen, Hilbertraum	M 7
4.4. Operatoren, Eigenwerte und Eigenfunktionen	M 9
5. Dirac'sche Deltafunktion	M 12
6. Elemente der Matrizenrechnung	
6.1. Lineare Gleichungssysteme und Matrizen	M 14
6.2. Matrixoperationen	M 15
6.3. Spezielle Matrizen	M 15
6.4. Spur und Determinante	M 18
6.5. Matrixeigenwertprobleme	M 18

Anhang P: REKAPITULATION EINIGER PHYSIKALISCHER BEGRIFFE

1. Newton'sche Mechanik für ein System von N Massenpunkten	P 1
2. Erhaltungssätze, Spindrehimpuls	P 3
3. Elektrostatik	
3.0. Mass-Systeme	P 4
3.1. Coulomb'sches Gesetz und Superpositionsprinzip	P 5
3.2. Ladungsdichte, Punktladungen	P 5
3.3. Elektrische Feldstärke	P 6
3.4. Elektrostatisches Potential	P 6
3.5. Elektrostatische potentielle Energie	P 7

Anhang U: <u>LOESUNGEN ZU DEN UEBUNGEN</u>	U 1
--------------------------------------------	-----

Empfohlene, aber nicht obligatorische Lehrbücher:

- L a P a g l i a, "Introductory Quantum Chemistry"
(Harper and Row, London, 1971)
- H e r z b e r g, "Atomic Spectra and Atomic Structure"
(Dover, New York, 1945)
- L . Z ü l i c k e, "Quantenchemie", Bd. 1
(VEB Deutscher Verlag der Wissenschaften,
Berlin, 1973)
- Sehr zu empfehlen für Autodidakten.