

Inhalt

Vorbemerkung — V

1 Warum Quantentheorie? — 1

- 1.1 Klassische Physik — 1
- 1.2 Strahlung eines schwarzen Körpers — 2
- 1.3 Wärmekapazitäten fester Körper — 5
- 1.4 Photoelektrischer Effekt — 7
- 1.5 Das Doppelspaltexperiment — 8
- 1.6 Compton-Beugung — 10
- 1.7 Welle-Teilchen-Dualismus — 10
- 1.8 Spektren — 11
- 1.9 Aufgaben mit Antworten — 12
- 1.10 Aufgaben — 14

2 Basis der Quantentheorie — 16

- 2.1 Die zeitabhängige Schrödinger-Gleichung — 16
- 2.2 Die zeitunabhängige Schrödinger Gleichung — 17
- 2.3 Die Wellenfunktion — 20
- 2.4 Heisenbergs Unschärferelation — 22
- 2.5 Mehrere Teilchen — 23
- 2.6 Aufgaben mit Antworten — 24
- 2.7 Aufgaben — 27

3 Operatoren und Quantentheorie — 28

- 3.1 Operatoren — 28
- 3.2 Erwartungswert — 30
- 3.3 Beispiel — 32
- 3.4 Eigenwerte and Eigenfunktionen — 32
- 3.5 Hermitesche Operatoren — 33
- 3.6 Kommutierende Operatoren — 36
- 3.7 Die Postulate der Quantentheorie — 38
- 3.8 Orts- und Impulsdarstellung — 41
- 3.9 Messwerte — 42
- 3.10 Aufgaben mit Antworten — 45
- 3.11 Aufgaben — 47

4 Teilchen im Kasten — 50

- 4.1 Die Schrödinger-Gleichung und ihre Lösungen — 50
- 4.2 Zeitabhängige Lösungen — 53
- 4.3 Erwartungswerte — 54

- 4.4 Vollständiger Satz — **56**
- 4.5 Kinetische Energie — **57**
- 4.6 Impulsdarstellung — **58**
- 4.7 Experimentelle Realisierungen: Konjugierte Moleküle — **60**
- 4.8 Experimentelle Realisierungen: Ketten aus Metallatomen — **64**
- 4.9 Ein Modell chemischer Bindungen — **66**
- 4.10 Mehrere Teilchen — **67**
- 4.11 Mehrere Dimensionen — **67**
- 4.12 Aufgaben mit Antworten — **71**
- 4.13 Aufgaben — **75**

5 Mehr oder weniger freie Teilchen — 77

- 5.1 Freies Teilchen in einer Dimension — **77**
- 5.2 Stufen — **79**
- 5.3 Tunneleffekt — **81**
- 5.4 Rastertunnelmikroskop — **87**
- 5.5 Chemische Reaktionen — **89**
- 5.6 Aufgaben mit Antworten — **90**
- 5.7 Aufgaben — **94**

6 Schwingungen — 95

- 6.1 Energie molekularer Systeme — **95**
- 6.2 Schwingungen eines Moleküls — **96**
- 6.3 Harmonischer Oszillator — **97**
- 6.4 Impulsdarstellung — **100**
- 6.5 Morse-Oszillator — **101**
- 6.6 Bezug zum Experiment — **104**
- 6.7 Aufgaben mit Antworten — **104**
- 6.8 Aufgaben — **110**

7 Rotationen — 112

- 7.1 Drehimpuls und Trägheitsmoment — **112**
- 7.2 2D-Rotor — **114**
- 7.3 3D-Rotor — **118**
- 7.4 Addition von Drehimpulsen — **127**
- 7.5 Spin des Elektrons — **129**
- 7.6 Bezug zum Experiment — **132**
- 7.7 Aufgaben mit Antworten — **135**
- 7.8 Aufgaben — **136**

8 Das Wasserstoffatom — 138

- 8.1 Experimentelle Befunde — **138**

- 8.2 Bohrs Modell für das Wasserstoffatom — 138
- 8.3 $\hat{H}$ für H — 141
- 8.4 $\hat{H}$ für e^- — 143
- 8.5 Andere zentralsymmetrische Systeme — 153
- 8.6 Drehimpuls — 154
- 8.7 Aufgaben mit Antworten — 157
- 8.8 Aufgaben — 157

9 Grundlagen der genäherten Verfahren — 159

- 9.1 Das Problem — 159
- 9.2 Variationsprinzip — 160
- 9.3 Variationsverfahren – ein Beispiel — 162
- 9.4 Variationsverfahren – allgemein — 163
- 9.5 Rayleigh-Ritz-Variationsverfahren – allgemein — 164
- 9.6 Rayleigh-Ritz-Variationsverfahren – ein Beispiel — 169
- 9.7 Zeitunabhängige Störungstheorie — 171
- 9.8 Zeitabhängige Störungstheorie — 172
- 9.9 Aufgaben mit Antworten — 174
- 9.10 Aufgaben — 183

10 Zwei Konzepte der Chemie — 186

- 10.1 Struktur und Orbitale — 186
- 10.2 Die Schrödinger-Gleichung für ein Molekül — 186
- 10.3 Born-Oppenheimer-Näherung — 189
- 10.4 Ein Beispiel — 191
- 10.5 Spin-Orbitale — 193
- 10.6 Hartree-Näherung — 194
- 10.7 Hartree-Fock-Näherung — 197
- 10.8 RHF und UHF — 203
- 10.9 Orbitalbild ade? — 205
- 10.10 Hartree-Fock-Roothaan-Verfahren — 207
- 10.11 Das Orbitalbild und Wechselwirkungen — 209
- 10.12 Wie viele Orbitale werden benötigt? — 211
- 10.13 Aufgaben — 211

11 Atome — 213

- 11.1 He — 213
- 11.2 Das Periodensystem — 215
- 11.3 Drehimpulse — 216
- 11.4 Spin-Bahn-Kopplung — 221
- 11.5 Kopplungen, Termsymbole und gute Quantenzahlen — 223
- 11.6 Über die räumliche Verteilung und die Energien der Atomorbitale — 226

11.7	Kugelförmige Atome —	227
11.8	Aufgaben mit Antworten —	229
11.9	Aufgaben —	230
12	Die kleinsten Moleküle —	232
12.1	Das Problem —	232
12.2	Das H_2^+ -Molekülion —	232
12.3	HeH^{2+} —	237
12.4	H_2 : Das LCAO-MO-Bild —	238
12.5	H_2 : Das VB-Bild —	239
12.6	H_2 : Korrelation —	241
12.7	H_2 : Energiebeiträge —	244
12.8	Aufgaben —	245
13	Andere zweiatomige Moleküle —	246
13.1	Ein einfaches Modell für ein AB-Molekül —	246
13.2	He_2 —	252
13.3	HeH —	253
13.4	Weitere diatomige Moleküle —	253
13.5	Aufgaben mit Antworten —	261
13.6	Aufgaben —	263
14	Hartree-Fock-Roothaan-basierte Methoden —	264
14.1	Hartree-Fock-Roothaan —	264
14.2	Basissätze —	267
14.3	Semiempirische und Ab-initio-Methoden —	273
14.4	Hückel-Theorie —	274
14.5	Korrelation —	278
14.6	CI und CC —	280
14.7	MCSCF und CASSCF —	283
14.8	MP —	284
14.9	Orbitale —	287
14.10	Orbitalenergien —	290
14.11	Aufgaben —	291
15	Dichtefunktionaltheorie —	293
15.1	Grundlagen —	293
15.2	Anfänge —	293
15.3	Hohenberg-Kohn-Theorie —	296
15.4	Kohn-Sham-Methode —	297
15.5	LDA und GGA —	299
15.6	Hartree-Fock vs. Kohn-Sham —	300

- 15.7 Gemischte Verfahren — 302
- 15.8 Schwache Wechselwirkungen und Dispersionskorrekturen — 303
- 15.9 Viele Funktionale — 306
- 15.10 Deskriptive DFT — 306
- 15.11 TDDFT und Anregungsenergien — 309
- 15.12 Lumineszenz — 313
- 15.13 Aufgaben mit Antworten — 315
- 15.14 Aufgaben — 315

16 Eigenschaften — 317

- 16.1 Einleitung — 317
- 16.2 Struktur — 321
- 16.3 Schwingungen — 327
- 16.4 Energien — 330
- 16.5 Dipolmoment — 337
- 16.6 Elektronendichten — 339
- 16.7 Atomare Ladungen — 341
- 16.8 Elektrostatisches Potential — 344
- 16.9 Elektromagnetische Felder — 345
- 16.10 Experimentelle Messgrößen — 347
- 16.11 Aufgaben mit Antworten — 348
- 16.12 Aufgaben — 351

17 Systeme — 352

- 17.1 Symmetrie — 352
- 17.2 Kristalle — 354
- 17.3 Lösungsmittelleffekte — 360
- 17.4 Makromoleküle und Enzyme — 362
- 17.5 Aufgaben mit Antworten — 363
- 17.6 Aufgaben — 367

18 Ergänzende Informationen — 368

- 18.1 Kontinuierliche Wahrscheinlichkeitsverteilungen — 368
- 18.2 Diracs δ -Funktion — 370
- 18.3 Diagonalisierung — 371
- 18.4 Iteratives Verfahren — 373
- 18.5 Boltzmann-, Fermi-Dirac- und Bose-Einstein-Verteilungen — 377
- 18.6 Funktionen, Funktionale, Operatoren — 378

19 Mathematische Formeln — 380

- 19.1 Trigonometrische Funktionen — 380
- 19.2 Kugelkoordinaten — 380

XII — Inhalt

19.3 Laplace-Operator — **381**

19.4 Integrale — **381**

Stichwortverzeichnis — 383