

Michael Springborg

Quantenchemie



Eine Einführung

DE GRUYTER

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 — 11
- 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 Heisenberg's Unschärferelation — 22
- 2.5 Aufgaben mit Antworten — 23
- 2.6 Aufgaben — 25

3 Operatoren und Quantentheorie — 26

- 3.1 Operatoren — 26
- 3.2 Erwartungswert — 28
- 3.3 Beispiel — 29
- 3.4 Eigenwerte and Eigenfunktionen — 30
- 3.5 Hermiteische Operatoren — 31
- 3.6 Kommutierende Operatoren — 33
- 3.7 Die Postulate der Quantentheorie — 35
- 3.8 Orts- und Impulsdarstellung — 37
- 3.9 Messwerte — 38
- 3.10 Aufgaben mit Antworten — 41
- 3.11 Aufgaben — 44

4 Teilchen im Kasten — 46

- 4.1 Die Schrödinger Gleichung und ihre Lösungen — 46
- 4.2 Zeitabhängige Lösungen — 48
- 4.3 Erwartungswerte — 49

- 4.4 Vollständiger Satz — 51
- 4.5 Kinetische Energie — 53
- 4.6 Impulsdarstellung — 54
- 4.7 Experimentelle Realisierungen: Konjugierte Moleküle — 55
- 4.8 Experimentelle Realisierungen: Ketten aus Metallatomen — 59
- 4.9 Ein Modell chemischer Bindungen — 61
- 4.10 Mehrere Teilchen — 63
- 4.11 Mehrere Dimensionen — 63
- 4.12 Aufgaben mit Antworten — 66
- 4.13 Aufgaben — 70

- 5 Mehr oder weniger freie Teilchen — 72**
- 5.1 Freies Teilchen in einer Dimension — 72
- 5.2 Stufen — 74
- 5.3 Tunneleffekt — 77
- 5.4 Rastertunnelmikroskop — 82
- 5.5 Chemische Reaktionen — 83
- 5.6 Aufgaben mit Antworten — 84
- 5.7 Aufgaben — 88

- 6 Schwingungen — 89**
- 6.1 Energie molekularer Systeme — 89
- 6.2 Schwingungen eines Moleküls — 90
- 6.3 Harmonischer Oszillator — 91
- 6.4 Impulsdarstellung — 95
- 6.5 Morse Oszillator — 95
- 6.6 Bezug zum Experiment — 97
- 6.7 Aufgaben mit Antworten — 98
- 6.8 Aufgaben — 103

- 7 Rotationen — 104**
- 7.1 Drehimpuls und Trägheitsmoment — 104
- 7.2 2D Rotor — 106
- 7.3 3D Rotor — 110
- 7.4 Addition von Drehimpulsen — 118
- 7.5 Spin des Elektrons — 120
- 7.6 Bezug zum Experiment — 123
- 7.7 Aufgaben mit Antworten — 126
- 7.8 Aufgaben — 127

- 8 Das Wasserstoffatom — 129**
- 8.1 Experimentelle Befunde — 129

- 8.2 Bohr's Modell für das Wasserstoffatom — 129
- 8.3 \hat{H} für H — 131
- 8.4 \hat{H} für e^- — 133
- 8.5 Andere zentralsymmetrische Systeme — 142
- 8.6 Drehimpuls — 144
- 8.7 Aufgaben mit Antworten — 146
- 8.8 Aufgaben — 147

- 9 Grundlagen der genäherten Verfahren — 148
 - 9.1 Das Problem — 148
 - 9.2 Variationsprinzip — 149
 - 9.3 Variationsverfahren – ein Beispiel — 151
 - 9.4 Variationsverfahren – allgemein — 152
 - 9.5 Rayleigh-Ritz Variationsverfahren – allgemein — 153
 - 9.6 Rayleigh-Ritz Variationsverfahren – ein Beispiel — 157
 - 9.7 Zeitunabhängige Störungstheorie — 159
 - 9.8 Zeitabhängige Störungstheorie — 160
 - 9.9 Aufgaben mit Antworten — 162
 - 9.10 Aufgaben — 171

- 10 Das Orbitalmodell — 172
 - 10.1 Struktur und Orbitale — 172
 - 10.2 Die Schrödinger Gleichung für ein Molekül — 172
 - 10.3 Born-Oppenheimer Näherung — 175
 - 10.4 Ein Beispiel — 177
 - 10.5 Spin-Orbitale — 179
 - 10.6 Hartree Näherung — 180
 - 10.7 Hartree-Fock Näherung — 183
 - 10.8 RHF und UHF — 188
 - 10.9 Orbitalbild adé? — 190
 - 10.10 Hartree-Fock-Roothaan Verfahren — 193
 - 10.11 Das Orbitalbild und Wechselwirkungen — 194
 - 10.12 Aufgaben — 195

- 11 Atome — 197
 - 11.1 He — 197
 - 11.2 Das Periodensystem — 199
 - 11.3 Drehimpulse — 201
 - 11.4 Spin-Bahn Kopplung — 205
 - 11.5 Kopplungen, Term Symbole und gute Quantenzahlen — 207
 - 11.6 Über die räumliche Verteilung und die Energien der Atomorbitale — 210

11.7	Aufgaben mit Antworten —	211
11.8	Aufgaben —	212
12	Die kleinsten Moleküle —	213
12.1	Das Problem —	213
12.2	Das H_2^+ Molekülion —	214
12.3	HeH^{2+} —	218
12.4	H_2 : das LCAO-MO Bild —	219
12.5	H_2 : das VB Bild —	221
12.6	H_2 : Korrelation —	221
12.7	H_2 : Energiebeiträge —	224
12.8	Aufgaben —	225
13	Andere zweiatomige Moleküle —	227
13.1	Ein einfaches Modell für ein AB Molekül —	227
13.2	He_2 —	232
13.3	HeH —	234
13.4	Weitere diatomige Moleküle —	234
13.5	Aufgaben mit Antworten —	243
13.6	Aufgaben —	244
14	Größere Systeme: Methoden —	246
14.1	Hartree-Fock-Roothaan —	246
14.2	Basissätze —	249
14.3	Semiempirische und ab initio Methoden —	255
14.4	Hückel Theorie —	255
14.5	Korrelation —	259
14.6	CI und CC —	262
14.7	MP —	264
14.8	DFT —	267
14.9	Kristalle —	271
14.10	Elektronische Anregungen —	275
14.11	Lösungsmittelleffekte —	280
14.12	Makromoleküle und Enzyme —	282
14.13	Elektromagnetische Felder —	283
14.14	Experimentelle Meßgrößen —	285
14.15	Aufgaben mit Antworten —	286
14.16	Aufgaben —	291
15	Größere Systeme: Anwendungen —	293
15.1	Einleitung —	293
15.2	Struktur —	297

15.3	Schwingungen —	300
15.4	Energien —	304
15.5	Dipolmoment —	311
15.6	Elektronendichten —	314
15.7	Atomare Ladungen —	316
15.8	Elektrostatiches Potential —	318
15.9	Orbitale —	319
15.10	Orbitalenergien —	322
15.11	Aufgaben mit Antworten —	324
15.12	Aufgaben —	325
16	Mathematische Formeln —	327
16.1	Trigonometrische Funktionen —	327
16.2	Kugelkoordinaten —	327
16.3	Laplace Operator —	328
16.4	Integrale —	328
Stichwortverzeichnis —		331