

Freimut Marschner

Quantenchemie mit Personal Computern

**Eine Einführung
mit interaktiven Programmen
für IBM-PC und Kompatible**

Das Buch enthält zwei Disketten

0,15



Walter de Gruyter
Berlin · New York 1991

Inhaltsverzeichnis

Symbole	XIII
0 Einleitung	1
1 Fundamentale Quantenchemie	5
1.1 Programm-Beispiel 1: Das Unbestimmtheitsprinzip	5
1.2 Programm-Beispiel 2: Das <i>Bohr</i> -Atommodell	10
1.3 Programm-Beispiel 3: Spektrallinien Wasserstoffähnlicher Isotope	19
2 Eigenfunktionen der Schrödinger-Gleichung	25
2.1 Programm-Beispiel 4: Funktionsdarstellung im Textmodus	26
2.2 Programm-Beispiel 5: Radial-Anteil von Eigenfunktionen des Wasserstoffatoms im Graphik-Modus	32
2.3 Programm-Beispiel 6: Winkel-Anteil von Eigenfunktionen	46
2.4 Programm-Beispiel 7: Eigenfunktionen in perspektivischer Flächendarstellung	56
2.5 Programm-Beispiel 8: Dreidimensionale Darstellung der Winkel-Anteile von Eigenfunktionen	65
3 Orbitalnäherungen	75
3.1 Programm-Beispiel 9: <i>Slater</i> -Orbitalexponenten	75
3.2 Programm-Beispiel 10: <i>Slater</i> -Orbitale (STO)	83
4 Linearkombination von Orbitalen	92
4.1 Programm-Beispiel 11: Hybridorbitale	96
4.2 Programm-Beispiel 12: Molekülorbitale (LCAO-MO-Ansatz)	106
4.3 Programm-Beispiel 13: Orbitale in Höhenliniendarstellung	113
5 Operatoren und Eigenwerte	123
5.1 Programm-Beispiel 14: Die <i>Schrödinger</i> -Gleichung als lineare $\frac{\partial^2}{\partial x^2}$ Differentialgleichung 2. Ordnung	123
5.2 Programm-Beispiel 15: Die <i>Schrödinger</i> -Gleichung als Eigenwertproblem	149
6 Approximationsmethoden für Molekülberechnungen	164
6.1 Die <i>Born-Oppenheimer</i> -Näherung	166

6.2 Die <i>Hartree-Fock</i> -Methode	167
6.3 Die <i>Roothaan-Hall</i> -(LCAO-MO-SCF)-Methode	171
6.4 Die Integralnäherungen (ZDO)	175
6.5 Semiempirische Methoden: MINDO/3 und MNDO	177
6.6 Molekülmechanik: das empirische MM-Modell	184
7 Integrale	189
7.1 Programm-Beispiel 16: numerische Integration bestimmter Integrale	189
7.2 Programm-Beispiel 17: numerische Integration nach <i>Gauss</i> , <i>Legendre</i> , <i>Hermite</i> , <i>Laguerre</i>	195
7.3 Programm-Beispiel 18: Überlappungsintegrale von <i>Slater</i> -Orbitalen	205
7.4 Programm-Beispiel 19: Klassifizierung und Redundanz von Integralen der Elektronenwechselwirkung	217
7.5 Programm-Beispiel 20: Integrale und Energieeigenwerte des Wasserstoffmoleküls und seines Kations	221
8 Das Hückel-Molekülorbital-Modell	233
8.1 Die Postulate und Parameter des HMO-Modells	233
8.2 Die charakteristischen Gleichungen des HMO-Modells	237
8.3 Interpretation der HMO-Energie	239
8.4 Reaktivität	242
8.5 Programm-Beispiel 21: Ein Zeichenprogramm mit der Maus zur Darstellung topologischer Matrizen	247
8.6 Programm-Beispiel 22: Matrizen-Algebra	255
8.7 Programm-Beispiel 23: Das <i>Jacobi</i> -Diagonalisierungsverfahren .	270
8.8 Programm-Beispiel 24: Diagramme von <i>Hückel</i> -Eigenwert-Koeffizienten und Molekülorbitalen	285
9 Korrelation	295
9.1 Eine Methode zur Parametrisierung des PPP-SCF-MO-Modells	295
9.2 Programm-Beispiel 25: Koordinaten von Linien und Ringsystemen	296
9.3 Programm-Beispiel 26: PPP-SCF-Berechnungen mit Konfigurationswechselwirkung	314
9.4 Programm-Beispiel 27: Lineare Regressions- und Varianz-Analyse experimenteller und berechneter Daten .	349
9.5 Programm-Beispiel 28: Symmetriegruppen und Charakteren-Tabellen	363

10 Anhang	381
10.1 Griechisches Alphabet	381
10.2 Energie-Umrechnungsfaktoren	381
10.3 Klassifizierung der Schlüsselworte von Turbo BASIC	381
10.4 Programm-Beispiel 29: ASCII-Zeichensatz	383
10.5 Programm-Beispiel 30: Bildschirmkonstante SCREEN.....	384
10.6 Programm-Beispiel 31: Disketten-Menü	385
10.7 Programmverzeichnis der Disketten und Bedienungshinweise ...	388
10.8 Glossar	390
11 Literaturverzeichnis	395
11.1 Lehrbücher und Monographien	395
11.2 Computer-Fachbücher	396
11.3 Hinweise zu Computer-Programmen	397
11.4 Originalarbeiten	397
12 Register	399

0/0