

GRUNDRISS DER QUANTENCHEMIE

HEINZWERNER PREUSS

Max-Planck-Institut für Physik und Astrophysik, München
Privatdozent für Theoretische Physikalische Chemie
an der Universität Frankfurt



BIBLIOGRAPHISCHES INSTITUT • MANNHEIM

INHALTSVERZEICHNIS

Vorwort	5
Physikalische Einheiten und Konstanten	9
1. <i>Einige Grundbegriffe der Quantenmechanik</i>	11
a) Die unrelativistische Wellengleichung	11
b) Eigenfunktionen und Eigenwerte	22
c) Drehimpuls, Spin und Pauliprinzip	28
2. <i>Allgemeine Näherungsmethoden</i>	39
a) Variationsverfahren	39
b) Störungsrechnungen	48
c) Weitere Methoden	58
3. <i>Grundsätzliches über die drei Verfahrenswege der Quantenchemie</i>	71
4. <i>Das halbempirische Verfahren</i>	84
a) Molekülenergien und Elektronegativitäten	84
b) Bindungsabstände, Atom- und Ionenradien	98
c) Systeme mit Ji-Elektronen, Bindungscharaktere (-Ordnungen)	102
d) Weitere halbempirische Zusammenhänge	108
5. <i>Theoretische Verfahren</i>	114
a) Die strengen Lösungen	114
b) Variationsverfahren und Korrelationsfunktionen	119
c) Die Determinatendarstellung und die Einelektronen- funktionen	125
d) Neue Ansätze für Einelektronenfunktionen und die damit auftretenden Integrale	134
e) Die Methode der Konfigurationenwechselwirkung	139
f) Self-consistent-field Verfahren	156
g) Die Methode der Molekülzustände	166
h) Valenzstrukturmethode	178
i) Die Mischung von Atomzuständen (Hybridisierung)	200
j) Die Wechselwirkungen von bewegten Atomen und Molekülen	209
k) Die Vorstellung der Atomassoziationen	222
6. <i>Halbtheoretische Verfahren</i>	229
a) Die halbtheoretischen Methoden der Molekülzustände und der Valenzstrukturen	229
b) Das Verfahren der „Atome in Molekülen“	265
c) Die Elektronengasmethode	276
d) Weitere Verfahren	291
Tabelle der Elektronenstrukturen der Elemente	297
Literaturverzeichnis	299
Sachverzeichnis	307