

QUANTENTHEORETISCHE CHEMIE

I

VON

HEINZWERNER PREUSS

Max-Planck-Institut für Physik und Astrophysik, München
Privatdozent für theoretische physikalische Chemie
an der Universität Frankfurt am Main



BIBLIOGRAPHISCHES INSTITUT MANNHEIM

HOCHSCHULTASCHENBÜCHER-VERLAG

Inhaltsverzeichnis

1. <i>Einleitung.</i>	9
2. <i>Die halbempirischen Regeln.</i>	17
a) <i>Einführung.</i>	17
b) <i>Energiehyperflächen und Molekülenergien.</i>	18
c) <i>Die Additivitätsregel.</i>	28
d) <i>Elektronegativität und Bindungseigenschaften.</i>	38
e) <i>Der Ionencharakter.</i>	42
f) <i>Die idealen Trennungsenergien.</i>	48
g) <i>Halbempirische Regeln über Kraftkonstanten.</i>	56
h) <i>Bindungsabstände, Atom- und Ionenradien.</i>	74
i) <i>Weitere halbempirische Beziehungen.</i>	84
3. <i>Zusammenfassung der verwendeten Bezeichnungsweisen und Symbole</i>	86
4. <i>Kurze Literaturangabe.</i>	88
<i>Sachregister.</i>	89

QUANTENTHEORETISCHE
CHEMIE

III

VON

HEINZWERNER PREUSS



BIBLIOGRAPHISCHES INSTITUT • MANNHEIM

HOCHSCHÜLTASCHESBÜCHER-VERLAG

INHALTSVERZEICHNIS

TEIL III/1

DIE WELLENMECHANISCHEN UND METHODISCHEN AUSGANGSPUNKTE

1. <i>Die Wechselwirkungen bei bewegten Atomen.</i>	9
2. <i>Aufbau und allgemeine Eigenschaften der W-Funktion.</i>	25
a) Das Pauli-Prinzip und die Dichtefunktionen.	25
b) Operatorengleichungen und Erwartungswerte.	42
3. <i>Qualitative Systematik der Atom- und Molekülzustände.</i>	55
a) Das Einelektronenatom.	55
b) Atome mit mehreren Elektronen.	64
c) Das Einelektronenmolekül.	97
d) Die Molekülzustände (MO-Verfahren).	104
e) Linearkombinationen von Atomfunktionen (LCAO-Darstellung)	111

TEIL III/2

DIE SPEZIELLEN QUANTENCHEMISCHEN VERFAHREN

1. <i>Die selbstkonsistenten Verfahren.</i>	121
a) Das Hartree-Verfahren	121
b) Die Methode nach Hartree und Fock (HF-Verfahren)	136
c) Die Roothaan-Hall-Methode (SCF-LCAO-Verfahren)	143
d) Halbtheoretische Fassungen des SCF-LCAO-Verfahrens	161

2. <i>Entwicklungen der Eigenfunktionen.</i>175
a) Variationsansätze.175
b) Konfigurationen-Wechselwirkung (CI-Verfahren).204
c) Determinantenentwicklungen.210
d) Korrelationsfunktionen.214
<i>Register.</i>218