

# 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 $\pi$ -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