

Inhalt

I. Einführung	1	Näherungsverfahren	42
Einleitung	1	„Nullte“ Näherung für zwei Elektronen:	42
Entwicklung	1	Störungstheorie	43
Bewegungsarten	2	Variationsmethode	43
(einfache) Translatorische Bewegung	2	Self Consistent Field Methode (SCF)	43
Einwirkung einer Kraft	2	Bahndrehimpuls und magnetisches Moment	43
Drehbewegung (Rotation)	3	Klassische Elektrodynamik	43
Schwingung (harmonischer Oszillator)	3	Spin-Bahn-Wechselwirkung	45
Zusammenfassung der Bewegungsarten	4	Kopplung bei mehreren Elektronen	46
Hinweise auf Quantisierung	4	Magnetische Momente	47
Entwicklung der Strahlungsgesetze	4	Magnetische Eigenschaften	48
Welle-Teilchen-Dualismus	4	Termsymbole (bei leichten Atomen)	48
Lichtquanten	5	Grobe Merkgeregeln für die Termsymbole der	
		Grundzustände	49
		Auswahlregeln für Strahlungsübergänge	50
II. Von Hamilton zu Schrödinger: Die		V. Einführung in die Molekülstruktur	51
 Quantenmechanik	6	Einfaches Beispiel: Das H_2^+	51
Die Schrödingergleichung	6	Näherungen einführen	51
Zeitunabhängige eindimensionale		Konzeptentwicklung zum Näherungsverfahren	52
Schrödingergleichung	6	Die chemische Bindung	53
Erweiterung der Schrödingergleichung	8	Bindende und antibindende Orbitale	53
Physikalische Interpretation der		MOs zweiatomiger Moleküle	54
Wellenfunktion ψ	9	Termsymbole für zweiatomige Moleküle	55
Eigenfunktionen	9	Die π^2 -Konfiguration	56
Weitere Eigenschaften der Wellenfunktion ψ	10	Symmetrieeigenschaften	56
Operatoren, Eigenfunktionen, Eigenwerte	10	Spektroskopie	57
Anwendung auf das Beispiel (I)	11	Auswahlregeln für elektronische Übergänge	57
HEISENBERGSche Unschärferelation	13	Auswahlregeln für die Kernbewegung	57
		Reines Rotationsspektrum	58
III. Einfache Modelle in der Quantenmechanik	15	Behandlung unterschiedlicher Rotatoren	58
A. Translatorische Bewegung	15	Entartung	60
A b) Teilchen im Kasten	15	Auswahlregeln für reine Rotationsspektren	61
A b) Erweiterung: Dreidimensionaler Kasten	17	Rotationsübergänge für elektrische Dipolstrahlung	62
A c) Tunneleffekt	18	RAMAN-Spektren (RAMAN-Effekt)	63
B. Schwingungen (harmonischer Oszillator)	18	Reines Schwingungsspektrum	65
C. Rotation	21	Anharmonischer Oszillator	65
Dichteverteilung	23	Schwingungsspektrum	66
Operatoren	23	Rotations-Schwingungsspektrum	67
Eigenwertgleichung	24	RAMAN-Schwingungsspektrum	67
Beispiele für nicht-kommutierende Operatoren	24	Schwingungsmoden polyatomiger Moleküle	67
Rotation in drei Dimensionen	25	Elektronenübergänge unter Berücksichtigung von	
Richtungsquantelung	27	Schwingung und Rotation	68
IV. Struktur und Spektroskopie von Atomen	28	BORN-OPPENHEIMER-Näherung	69
Das Wasserstoffatom	28	Elektronenübergang im Detail	69
Schwerpunktsystem	28	Vektoraddition der Drehimpulse in einem Molekül	70
Energieniveaus	31	Linienbreiten	70
Spektroskopie	31		
Auswahlregeln für erlaubte Übergänge	31		
Orbitale	33		
s-Orbitale	34		
p-Orbitale	34		
2p-Orbital	35		
Mehrelektronenatome	35		
Helium-Atom	35		
Vertauschbarkeit identischer Teilchen	37		
PAULI-Prinzip	39		
Spin-Addition	39		
Aufbauprinzip des PSE	40		
HUNDSche Regeln	40		