

---

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Die Grenzen der klassischen Physik</b>	<b>3</b>
2.1	Dualismus Welle-Teilchen	3
2.2	De Broglie-Wellenlänge	6
2.3	Heisenberg'sche Unschärferelation	7
<b>3</b>	<b>Grundlagen der Quantenmechanik – Wellenmechanik</b>	<b>11</b>
3.1	Wellenbewegung	11
3.2	Stehende Wellen	13
3.3	Die zeitunabhängige Schrödingergleichung	14
3.4	Born'sche Interpretation der Wellenfunktion $\psi$	15
3.5	Freies Teilchen	16
3.6	Teilchen im Kasten	17
3.7	Tunneleffekt	23
3.8	Harmonischer Oszillator	28
3.8.1	Klassische Behandlung	28
3.8.2	Quantenmechanische Behandlung	29
3.9	Starrer Rotator	32
3.9.1	Starrer Rotator mit raumfester Achse	34
3.9.2	Starrer Rotator mit raumfreier Achse	36
3.10	Das Wasserstoffatom	41
3.11	Das Heliumatom und die Variationsmethode	49
3.12	Zeitabhängige Wellenfunktion und Spinquantenzahl $m_s$	53
3.13	Atome mit mehreren Elektronen	57
3.13.1	Pauliprinzip, Hund'sche Regeln, Aufbauprinzip der Atome	57
3.13.2	Gesamtbahndrehimpuls, Gesamtspin und Gesamtdrehimpuls	58
3.14	Das Elektron als Welle; reale und komplexe Wellenfunktionen	62
<b>4</b>	<b>Die chemische Bindung</b>	<b>63</b>
4.1	Valenztheorie	63
4.2	Ionische Bindung	64

4.3	Kovalente Bindung . . . . .	66
4.3.1	Das Wasserstoff-Molekülion $H_2^+$ . . . . .	66
4.3.2	Molekülorbitaltheorie (LCAO-MO) . . . . .	68
4.3.3	Valence-Bond-Theorie (VB) . . . . .	70
4.3.4	Das $H_2$ -Molekül . . . . .	73
4.3.5	Komplexverbindungen, Ligandenfeld-Konzept. . . . .	76
4.4	Metallische Bindung . . . . .	78
4.5	Van der Waals'sche Bindung . . . . .	79
<b>5</b>	<b>Grundlagen der Spektroskopie</b> . . . . .	<b>81</b>
5.1	Molekülspektren . . . . .	81
5.2	Extinktion elektromagnetischer Wellen . . . . .	85
5.3	Rotationsspektroskopie . . . . .	86
5.4	Schwingungsspektroskopie . . . . .	88
5.5	Raman-Spektroskopie. . . . .	93
5.5.1	Raman-Rotationsspektroskopie. . . . .	94
5.5.2	Raman-Schwingungsspektroskopie . . . . .	96
5.6	Elektronische Bandenspektren . . . . .	97
5.7	Moleküle im elektrischen und magnetischen Feld (Grundlagen von NMR und ESR) . . . . .	99
5.7.1	Kernspinresonanz ( <i>Nuclear Magnetic Resonance</i> , NMR) . . . . .	101
5.7.2	Elektronenspinresonanz (ESR). . . . .	110
	<b>Anhang I: Mathematische Hilfsmittel</b> . . . . .	<b>113</b>
	<b>Anhang II: Physikalische Größen und physikalische Konstanten</b> . . . . .	<b>119</b>
	<b>Literatur</b> . . . . .	<b>121</b>
	<b>Sachverzeichnis</b> . . . . .	<b>123</b>

Einführung in die Quantenchemie

Aufbau der Atome und Moleküle, Spektroskopie

Lechner, M.D.

2017, VIII, 125 S. 71 Abb., Softcover

ISBN: 978-3-662-49882-8