

Inhalt

<i>Vorwort des Übersetzer</i>	V
<i>Vorwort des Autors</i>	VII
1. Mathematische Vorbemerkungen	1
1.1 Koordinatensysteme	1
1.2 Determinanten	5
1.3 Summen- und Produktschreibweise	7
1.4 Vektoren	7
1.5 Komplexe Zahlen	12
1.6 Operatoren	13
1.7 Eigenwertgleichungen	16
1.8 Zusammenfassung	17
2. Klassische Mechanik	18
2.1 Konservative Systeme	18
2.2 Ein Beispiel aus der <i>Newtonschen</i> Mechanik	20
2.3 Die Bewegungsgleichungen von <i>Lagrange</i> und <i>Hamilton</i>	22
2.4 Innere Koordinaten und die Bewegung des Massenzentrums	28
2.5 Die Grundlagen der klassischen Mechanik	30
2.6 Zusammenfassung	30
3. Quantenmechanik	31
3.1 Atomspektren, Strahlung des schwarzen Körpers und der lichtelektrische Effekt	31
3.2 Die Formulierungen der Quantenmechanik	44
3.3 Die Postulate der Quantenmechanik	45
3.4 Anwendungen der Postulate auf einfache Systeme	53
3.5 Störungsrechnung	67
3.6 Zusammenfassung	75
4. Spektroskopie und spektroskopische Messungen	76
4.1 Einheiten	77
4.2 Zur Frage der Absorptionsstärke	79
4.3 Überblick über die spektroskopischen Methoden	88
4.4 Zusammenfassung	93
5. Rotation und Schwingung von Molekülen	94
5.1 Das Näherungsmodell des starren Rotators	95
5.2 Reine Rotationsspektroskopie	101
5.3 Intensitäten und Auswahlregeln	102
5.4 Der harmonische Oszillator und die Schwingungsspektroskopie	104
5.5 Schwingungs-Rotations-Spektroskopie	110
5.6 Eine exaktere Theorie der Rotations-Schwingungs-Spektroskopie	112
5.7 Die <i>Morse</i> -Funktion, Dissoziationsenergie und die Anharmonizitätskonstante	119

5.8	Schwingungsspektroskopie komplexer Moleküle	121
5.9	<i>Raman</i> -Spektroskopie	124
5.10	Zusammenfassung	124
6.	Die elektronische Struktur von Atomen	125
6.1	Das Wasserstoffatom und die wasserstoffähnlichen Ionen	126
6.2	Die physikalische Bedeutung der wasserstoffähnlichen Orbitale	131
6.3	Das Spektrum des atomaren Wasserstoffs: Auswahlregeln	141
6.4	Atomare Einheiten	142
6.5	Das Helium-Atom	143
6.6	Bahndrehimpuls	149
6.7	Elektronenspin	156
6.8	Identische Teilchen und das <i>Pauli</i> -Prinzip	158
6.9	Die Theorie unabhängiger Elektronen für komplexe Atome	162
6.10	Das Aufbau-Prinzip und das Periodensystem	166
6.11	Zusammenfassung	174
7.	Moleküle und chemische Bindung	175
7.1	Das Wasserstoffmolekül-Ion H_2^+	175
7.2	Das Variationsprinzip und die LCAO-Methode	180
7.3	Angeregte Zustände von H_2	187
7.4	Das Wasserstoff-Molekül	189
7.5	Verbesserungen der Wellenfunktion für H_2^+	194
7.6	MO-Theorie komplexerer zweiatomiger Moleküle	197
7.7	Angeregte Zustände und Elektronenspektren zweiatomiger Moleküle	206
7.8	Lokalisierte Bindungen, Hybridorbitale und gerichtete Valenz	213
7.9	Die σ - π -Beschreibung von Äthylen und Acetylen	217
7.10	Zusammenfassung	217
8.	Die elektronische Struktur konjugierter Systeme	218
8.1	Die LCAO-MO-Methode konjugierter Kohlenwasserstoffe	219
8.2	Die einfache <i>Hückel</i> -Methode	221
8.3	Äthylen	222
8.4	Butadien, $CH_2=CH-CH=CH_2$	224
8.5	Die Vereinfachung quantenmechanischer Berechnungen mit Hilfe von Symmetrieeigenschaften	232
8.6	Elektronenspektren konjugierter Kohlenwasserstoffe	238
8.7	Zusammenfassung	243
9.	Magnetische Elektronen- und Kernresonanzspektroskopie	244
9.1	Die Wechselwirkung eines isolierten Teilchens vom Spin 1/2 mit einem angelegten magnetischen Feld	245
9.2	EMR-Spektroskopie – Hyperfein-Wechselwirkungen	247
9.3	Kopplungskonstanten und elektronische Struktur von Molekülen	256
9.4	NMR-Spektroskopie – die chemische Verschiebung	258
9.5	NMR-Spektroskopie – Spin-Spin-Aufspaltung	262
9.6	Linienbreiten, Relaxationszeiten und die Unschärferelation	265
9.7	Zusammenfassung	267

Anhang von Werner A. P. Luck	268
I. Grundlagen des Molekülbaus	268
II. Grundlagen der Schrödinger-Gleichung	275
III. Orthogonalitätsbeziehung der Wellenfunktionen	280
IV. Coulombkräfte als Ursache der Reaktionswärmen	282
V. Prinzipien der MO- und LCAO-Verfahren	287
VI. Einige gruppentheoretische Bemerkungen	289
<i>Sachverzeichnis</i>	297