

Inhaltsverzeichnis

I Elektronen in Atomen

1.1	Vorbemerkung	1
1.2	Bohrsche Theorie des Wasserstoffatoms	1
1.3	Das Spektrum des Wasserstoffatoms	4
1.4	Die Notwendigkeit einer Modifizierung der Bohrschen Theorie	7
1.5	Elektronenwellen	8
1.6	Die Unbestimmtheitsrelation	9
1.7	Die Wellenfunktion	10
1.8	Die Schrödinger-Gleichung	11
1.9	Die Normierungskonstante	11
1.10	Der Radialanteil der Wellenfunktion	11
1.11	Der winkelabhängige Anteil der Wellenfunktion	12
1.12	Orbitale	12
1.13	Der Elektronenspin	15
1.14	Die Theorie von Mehrelektronenatomen	18
1.15	Russell-Saunders-Terme	19
1.16	Ionisierungspotentiale	24
1.17	Elektronenaffinitäten	30

II Zweiatomige Moleküle

2.1	Kovalente Bindung	32
2.2	Molekülorbitaltheorie	34
2.3	Bindende und antibindende Molekülorbitale	35
2.4	Energieniveaus von Molekülorbitalen	37
2.5	Das Wasserstoffmolekül	41
2.6	Bindungslängen von H_2^+ und H_2	41
2.7	Bindungsenergien von H_2^+ und H_2	42
2.8	Die Eigenschaften von H_2^+ und H_2 in einem magnetischen Feld	42
2.9	Homonukleare zweiatomige Moleküle der zweiten Periode	43
2.10	Andere A_2 -Moleküle	52
2.11	Termsymbole für lineare Moleküle	53
2.12	Heteronukleare zweiatomige Moleküle	55
2.13	Energieniveaudiagramm der Molekülorbitale von LiH	59
2.14	Grundzustand von LiH	60
2.15	Dipolmomente	61
2.16	Elektronegativität	62
2.17	Ionenbindung	65
2.18	Ein einfaches Ionenmodell für die Alkalimetallhalogenide	67
2.19	Allgemeine AB-Moleküle	70

III Lineare dreiatomige Moleküle

3.1	BeH_2	77
3.2	Energieniveaus von BeH_2	80
3.3	BeH_2 nach der Valenzbindungstheorie	82
3.4	Lineare dreiatomige Moleküle mit π -Bindung	84

3.5	Bindungseigenschaften von CO_2	88
3.6	Ionogene dreiatomige Moleküle: die Erdalkalimetallhalogenide	89
IV Trigonal-planare Moleküle		
4.1	BF_3	93
4.2	σ -Molekülorbitale	94
4.3	π -Molekülorbitale	96
4.4	Energieniveaus von BF_3	98
4.5	Die Äquivalenz der σ_x - und σ_y -Orbitale	98
4.6	Der Grundzustand von BF_3	100
4.7	Die Valenzbindungsnaheerung für BF_3	101
4.8	Andere trigonal-planare Moleküle	103
V Tetraedrische Moleküle		
5.1	CH_4	105
5.2	Grundzustand von CH_4	106
5.3	Der Tetraederwinkel	108
5.4	CH_4 nach der VB-Methode	109
5.5	Andere tetraedrische Moleküle	110
VI Trigonal-pyramidale Moleküle		
6.1	NH_3	113
6.2	Die Überlappung bei den σ_x -, σ_y - und σ_z -Orbitalen	115
6.3	Die interelektronischen Abstoßungen und die H–N–H-Bindungswinkel in NH_3	118
6.4	Bindungswinkel von anderen trigonal-pyramidalen Molekülen	120
6.5	Grundzustand von NH_3	120
VII Gewinkelte dreiatomige Moleküle		
7.1	H_2O	124
7.2	Der Grundzustand von H_2O	126
7.3	Gewinkelte dreiatomige Moleküle mit π -Bindung: NO_2	130
7.4	σ -Orbitale	131
7.5	π -Orbitale	131
7.6	Grundzustand von NO_2	131
VIII Die Bindung in organischen Molekülen		
8.1	Einführung	136
8.2	C_2H_4	137
8.3	Energieniveaus von C_2H_4	138
8.4	Grundzustand von C_2H_4	138
8.5	„Bogenbindungen“ im Molekül C_2H_4	140
8.6	Bindungseigenschaften der C=C-Gruppe	142
8.7	Der β_{CC} -Wert von C_2H_4	142
8.8	H_2CO	143
8.9	Der Grundzustand von H_2CO	145
8.10	Der $n \rightarrow \pi^*$ -Übergang der Carbonylgruppe	146
8.11	C_2H_2	146
8.12	Der Grundzustand von C_2H_2	147

8.13	CH_3CN	148
8.14	C_6H_6	148
8.15	Energien der Molekülorbitale von C_6H_6	150
8.16	Der Grundzustand von C_6H_6	150
8.17	Resonanzenergie von C_6H_6	152

IX Bindungen unter Beteiligung von d-Valenzorbitalen

9.1	Einführung	154
9.2	Der oktaedrische Komplex $\text{Ti}(\text{H}_2\text{O})_6^{3+}$	154
9.3	Energieniveaus von $\text{Ti}(\text{H}_2\text{O})_6^{3+}$	157
9.4	Grundzustand von $\text{Ti}(\text{H}_2\text{O})_6^{3+}$	158
9.5	Das Elektronenspektrum von $\text{Ti}(\text{H}_2\text{O})_6^{3+}$	160
9.6	VB-Theorie von $\text{Ti}(\text{H}_2\text{O})_6^{3+}$	160
9.7	Kristallfeldtheorie von $\text{Ti}(\text{H}_2\text{O})_6^{3+}$	162
9.8	Die Beziehung der allgemeinen MO-Behandlung zur VB-Theorie und zur Kristallfeldtheorie	164
9.9	Typen der π -Bindung in Metallkomplexen	164
9.10	Quadratisch-planare Komplexe	165
9.11	Tetraedrische Komplexe	168
9.12	Der Wert von Δ	171
9.13	Die magnetischen Eigenschaften von Komplexen: Liganden mit schwachem und mit starkem Feld	176
9.14	Die Elektronenspektren oktaedrischer Komplexe	176

Literatur	186
Schlußbemerkung	187
Anhang	188
Sachregister	190