

# Inhalt

|                                                                                     |     |
|-------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| <i>Zur Konzeption des Gesamtwerkes</i> .....                                        | V   |
| <i>Vorwort</i> .....                                                                | VII |
| <b>I. Grundlagen</b> .....                                                          | 1   |
| <b>I.1. Quantenmechanik</b> .....                                                   | 1   |
| I.1.1. Postulate der Quantenmechanik .....                                          | 2   |
| I.1.1.1. Die $\Psi$ -Funktion .....                                                 | 2   |
| I.1.1.2. Operatoren .....                                                           | 3   |
| I.1.1.3. Die zeitabhängige <i>Schrödinger</i> Gleichung .....                       | 6   |
| I.1.1.4. Erwartungswert .....                                                       | 6   |
| I.1.2. Ergänzende Hilfssätze .....                                                  | 10  |
| I.1.2.1. Normierung und Orthogonalität .....                                        | 10  |
| I.1.2.2. Hermiteische Operatoren .....                                              | 12  |
| I.1.2.3. Lineare Operatoren .....                                                   | 12  |
| I.1.2.4. Orthogonalität von Eigenfunktionen zu verschiedenen Eigen-<br>werten ..... | 13  |
| I.1.2.5. Entartung .....                                                            | 13  |
| I.1.2.6. Entwicklungssatz .....                                                     | 14  |
| I.1.2.7. Vertauschbare Operatoren .....                                             | 15  |
| I.1.2.8. Nichtkombinationssatz .....                                                | 17  |
| I.1.3. Näherungsverfahren, Störungs- und Variationsrechnung .....                   | 18  |
| I.1.3.1. Störungsrechnung für nicht entartete Systeme .....                         | 18  |
| I.1.3.2. Störungsrechnung für entartete Systeme .....                               | 21  |
| I.1.3.3. Variationsprinzip .....                                                    | 26  |
| I.1.3.4. Linearer Variationsansatz .....                                            | 29  |
| <b>I.2. Gruppentheorie</b> .....                                                    | 31  |
| I.2.1. Definition der Gruppe .....                                                  | 32  |
| I.2.1.1. Das gleichseitige Dreieck .....                                            | 32  |
| I.2.2. Darstellungstheorie .....                                                    | 37  |
| I.2.2.1. Darstellungen einer Gruppe .....                                           | 37  |
| I.2.2.2. Äquivalente Darstellungen .....                                            | 40  |
| I.2.2.3. Reduzibilität und Irreduzibilität von Darstellungen .....                  | 40  |
| I.2.2.4. Charaktere von Darstellungen .....                                         | 41  |
| I.2.3. Unendliche Gruppen, Kugeldrehgruppe .....                                    | 43  |
| I.2.4. Gruppentheorie und Quantenmechanik .....                                     | 45  |
| I.2.5. Das direkte Produkt .....                                                    | 49  |
| <b>II. Anwendungen</b> .....                                                        | 51  |
| <b>II.1. Das Elektron im Potentialkasten</b> .....                                  | 51  |
| II.1.1. Der eindimensionale Kasten mit unendlich hohen Wänden .....                 | 51  |
| II.1.2. Der zweidimensionale Potentialkasten mit unendlich hohen Wänden .           | 55  |
| II.1.3. Das <i>Kronig-Penney</i> -Modell .....                                      | 58  |

|                                                                                              |     |
|----------------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| II.2. Atome .....                                                                            | 66  |
| II.2.1. Das Wasserstoffatom .....                                                            | 66  |
| II.2.1.1. Lösungen des Wasserstoffatomproblems .....                                         | 66  |
| II.2.1.2. Der Drehimpuls .....                                                               | 75  |
| II.2.1.3. Hybridisierung .....                                                               | 84  |
| II.2.2. Das Heliumatom .....                                                                 | 85  |
| II.2.2.1. Der Spin des Elektrons, <i>Pauliprinzip</i> .....                                  | 92  |
| II.3. Moleküle .....                                                                         | 95  |
| II.3.1. Das Wasserstoffmolekülion $H_2^+$ .....                                              | 95  |
| II.3.2. Zweiatomige Moleküle .....                                                           | 99  |
| II.3.2.1. Vergleich zwischen MO- und VB-Methode .....                                        | 102 |
| II.3.3. <i>Hückelnäherung zur Beschreibung von <math>\pi</math>-Elektronensystemen</i> ..... | 104 |
| II.3.3.1. Äthylen .....                                                                      | 108 |
| II.3.3.2. Butadien .....                                                                     | 109 |
| II.3.3.3. Benzol .....                                                                       | 113 |
| II.3.3.4. Elektrische Dipolübergänge .....                                                   | 114 |
| II.3.3.5. Das Auffinden symmetrieadaptierter Funktionen .....                                | 118 |
| II.3.3.6. Allgemeine Lösungen für lineare Kohlenstoffketten- und Ring-<br>systeme .....      | 122 |
| II.4. Ligandenfeldtheorie .....                                                              | 123 |
| II.4.1. Die Methode des schwachen Feldes .....                                               | 127 |
| II.4.2. Die Methode des starken Feldes .....                                                 | 127 |
| <b>III. Anhang</b> .....                                                                     | 139 |
| III.1. Charakterentafeln einer wichtigen Punktgruppe .....                                   | 139 |
| III.2. Matrizen und Determinanten .....                                                      | 141 |
| III.3. Koordinatentransformation .....                                                       | 144 |
| III.4. Einige Koordinatensysteme .....                                                       | 145 |
| III.5. Literatur .....                                                                       | 146 |
| Sachverzeichnis .....                                                                        | 148 |