

# Inhaltsverzeichnis

Symbole .....	XIII
0 Einleitung .....	1
1 Fundamentale Quantenchemie .....	5
1.1 Programm-Beispiel 1: Das Unbestimmtheitsprinzip .....	5
1.2 Programm-Beispiel 2: Das <i>Bohr</i> -Atommodell .....	10
1.3 Programm-Beispiel 3: Spektrallinien Wasserstoffähnlicher Isotope .....	19
2 Eigenfunktionen der Schrödinger-Gleichung .....	25
2.1 Programm-Beispiel 4: Funktionsdarstellung im Textmodus .....	26
2.2 Programm-Beispiel 5: Radial-Anteil von Eigenfunktionen des Wasserstoffatoms im Graphik-Modus .....	32
2.3 Programm-Beispiel 6: Winkel-Anteil von Eigenfunktionen .....	46
2.4 Programm-Beispiel 7: Eigenfunktionen in perspektivischer Flächendarstellung .....	56
2.5 Programm-Beispiel 8: Dreidimensionale Darstellung der Winkel-Anteile von Eigenfunktionen ....	65
3 Orbitalnäherungen .....	75
3.1 Programm-Beispiel 9: <i>Slater</i> -Orbitalexponenten .....	75
3.2 Programm-Beispiel 10: <i>Slater</i> -Orbitale (STO) .....	83
4 Linearkombination von Orbitalen .....	92
4.1 Programm-Beispiel 11: Hybridorbitale .....	96
4.2 Programm-Beispiel 12: Molekülorbitale (LCAO-MO-Ansatz) .....	106
4.3 Programm-Beispiel 13: Orbitale in Höhenliniendarstellung ....	113
5 Operatoren und Eigenwerte .....	123
5.1 Programm-Beispiel 14: Die <i>Schrödinger</i> -Gleichung als lineare Differentialgleichung 2. Ordnung .....	123
5.2 Programm-Beispiel 15: Die <i>Schrödinger</i> -Gleichung als Eigenwertproblem .....	149
6 Approximationsmethoden für Molekülberechnungen .....	164
6.1 Die <i>Born-Oppenheimer</i> -Näherung .....	166

6.2 Die <i>Hartree-Fock</i> -Methode .....	167
6.3 Die <i>Roothaan-Hall</i> -(LCAO-MO-SCF)-Methode .....	171
6.4 Die Integralsnherungen (ZDO) .....	175
6.5 Semiempirische Methoden: MINDO/3 und MNDO .....	177
6.6 Moleklmechanik: das empirische MM-Modell .....	184
 7 Integrale .....	 189
7.1 Programm-Beispiel 16: numerische Integration bestimmter Integrale	189
7.2 Programm-Beispiel 17: numerische Integration nach <i>Gauss</i> , <i>Legendre</i> , <i>Hermite</i> , <i>Laguerre</i> .....	195
7.3 Programm-Beispiel 18: berlappungsintegrale von <i>Slater</i> -Orbitalen	205
7.4 Programm-Beispiel 19: Klassifizierung und Redundanz von Integralen der Elektronenwechselwirkung	217
7.5 Programm-Beispiel 20: Integrale und Energieeigenwerte des Wasserstoffmolekls und seines Kations	221
 8 Das Hckel-Moleklorbital-Modell .....	 233
8.1 Die Postulate und Parameter des HMO-Modells .....	233
8.2 Die charakteristischen Gleichungen des HMO-Modells .....	237
8.3 Interpretation der HMO-Energie .....	239
8.4 Reaktivitt .....	242
8.5 Programm-Beispiel 21: Ein Zeichenprogramm mit der Maus zur Darstellung topologischer Matrizen ....	247
8.6 Programm-Beispiel 22: Matrizen-Algebra .....	255
8.7 Programm-Beispiel 23: Das <i>Jacobi</i> -Diagonalisierungsverfahren .	270
8.8 Programm-Beispiel 24: Diagramme von <i>Hckel</i> -Eigenwert-Koeffizienten und Moleklorbitalen .....	285
 9 Korrelation .....	 295
9.1 Eine Methode zur Parametrisierung des PPP-SCF-MO-Modells ....	295
9.2 Programm-Beispiel 25: Koordinaten von Linien und Ringsystemen	296
9.3 Programm-Beispiel 26: PPP-SCF-Berechnungen mit Konfigurationswechselwirkung .....	314
9.4 Programm-Beispiel 27: Lineare Regressions- und Varianz-Analyse experimenteller und berechneter Daten .	349
9.5 Programm-Beispiel 28: Symmetriegruppen und Charakteren-Tabellen	363

<b>10 Anhang .....</b>	<b>381</b>
10.1 Griechisches Alphabet .....	381
10.2 Energie-Umrechnungsfaktoren .....	381
10.3 Klassifizierung der Schlüsselworte von Turbo BASIC .....	381
10.4 Programm-Beispiel 29: ASCII-Zeichensatz .....	383
10.5 Programm-Beispiel 30: Bildschirmkonstante SCREEN.....	384
10.6 Programm-Beispiel 31: Disketten-Menü .....	385
10.7 Programmverzeichnis der Disketten und Bedienungshinweise ...	388
10.8 Glossar .....	390
 <b>11 Literaturverzeichnis .....</b>	 <b>395</b>
11.1 Lehrbücher und Monographien .....	395
11.2 Computer-Fachbücher .....	396
11.3 Hinweise zu Computer-Programmen .....	397
11.4 Originalarbeiten .....	397
 <b>12 Register .....</b>	 <b>399</b>