

Chemische Bindung

Joachim Sauer
Humboldt-Universität, Institut für Chemie
Vorlesung im WS 2009/10

© Joachim Sauer • "Chemische Bindung", WS 2009-10 Humboldt-Universität

Voraussetzungen: PC III "Quantenchemie und Spektroskopie"/
Gruppentheorie

(1) **P.W. Atkins**, Physik. Chem., VCH, Weinheim 1990, Kapitel 16. Aufbau der Moleküle

(3) **Haken/Wolf**, Molekülphysik und Quantenchemie, Springer-Verlag 1992

(9) **J. Reinhold**, Quantentheorie der Moleküle, Teubner, Stuttgart 1994

Zusatzliteratur:

(2) **W. Kutzelnigg**, Einführung in die Theoret. Chem., Band 2, Die chemische Bindung.

(5) **R.B. Woodward u. R. Hoffmann**, Die Erhaltung der Orbitalsymmetrie, Verlag Chemie, Weinheim, 1970

(6) **R. Hoffmann**, Solids and Surfaces, VCH, Weinheim 1988

(7) **A. P. Sutton**, Elektronische Struktur in Materialien, VCH, Weinheim 1996

(4) **R. McWeeny**, Coulsons Chemische Bindung, S. Hirzel, Stuttgart 1984

(8) **Th Klapötke u. A. Schulz**, Quantenmechanische Methoden in der Hauptgruppenchemie, Spektrum, Heidelberg 1996

© Joachim Sauer • "Chemische Bindung", WS 2009-10 Humboldt-Universität

Inhalt

1. Chemische Bindung in zweiatomigen Molekülen (H₂-Molekül) (Lit. 3)
2. MO-Theorie mehratomiger Moleküle
3. Näherungsverfahren für N-Elektronensysteme
4. π-Elektronensysteme: HMO-Theorie
5. Symmetriebetrachtungen zur Reaktivität von π-Elektronensystemen - Woodward-Hoffmann-Regeln (Lit. 5)
6. Quantenmechanische Beschreibung von Festkörpern - Translationssymmetrie (Lit. 6,7)
7. Potentialflächen und Kernbewegung

© Joachim Sauer • "Chemische Bindung", WS 2009-10 Humboldt-Universität

Quantenmechanik - Theorie der Chemischen Bindung

$$\hat{H}_n(r_1, \dots, r_n) = \sum_{p=1}^n \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_p^2 \right] + \sum_{i>j} \frac{q_i \cdot q_j}{r_{ij}}$$

$$\hat{H}_n(r_1, \dots, r_n) \Psi(r_1, \dots, r_n) = E_R \Psi(r_1, \dots, r_n) \Big|_R$$

Coulombsches
Wechselwirkung
zwischen
Elektronen u. Kernen



P. Dirac, Proc. Roy. Soc. (London) A123 (1929) 714:

„The general theory of quantum mechanics is now almost complete...

The underlying physical laws necessary for the mathematical theory of the whole of chemistry are thus completely known, and the difficulty is only that the exact application of these laws leads to equations that are much too complicated to be soluble.“

© Joachim Sauer • "Chemische Bindung", WS 2009-10 Humboldt-Universität

The Royal Swedish Academy of Sciences has awarded
The 1998 Nobel Prize in Chemistry in the area of quantum chemistry to

Walter Kohn, University of California at Santa Barbara, USA and
John A. Pople, Northwestern Univ., Evanston, Ill., USA (British citizen).



Citation:

"to Walter Kohn for his development of the **density-functional theory** and to John Pople for his development of **computational methods in quantum chemistry**."

