1. Einleitung: Übersicht, Ziele Gliederung, Literatur (Forts.)

Literatur

R. Hoffmann	Begegung von Chemie und Physik im Festkörper	Angew. Chem. **99**, 871 (1987)	Bib.
R. Hoffmann	Solids and Surfaces: A Chemist's View of Bonding in Extended Structures	Verlag Chemie	Bib.
A. P. Sutton	Elektronische Struktur in Materialien	Verlag Chemie	Bib.
J. K. Burdett	Chemical Bonding in Solids	Oxford Univ. Press	(Bib.)
Lehrbücher der Festkörperchemie (z.B. Müller) Lehrbücher der Physikalischen Chemie/Quantenchemie Lehrbücher der Festkörperphysik (z.B. Kittel)			

2. LCAO-Ansatz: Der Festkörper als 'Riesenmolekül'

2.1. 0-dimensionaler Fall: Atome und Moleküle (Wdh.)

2.1.1. Atomorbitale

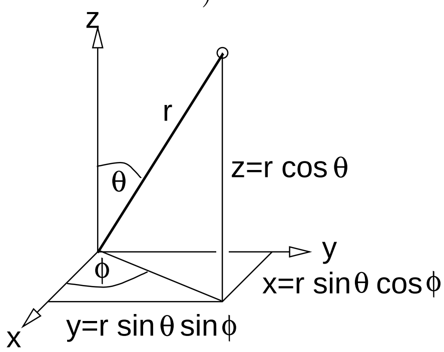
Lösungen der Schrödinger-Gleichung für das Wasserstoffatom

Eigenenergien: $\mathrm{E_n}$

Eigenfunktionen: $\psi_{\mathrm{n,l,m_l}} = \mathrm{NR_{n,l}(r)}\chi_{\mathrm{l,m_l}}(\theta,\phi)$

Z=1, $\mathrm{a_0} = 52.917$pm (Bohr'scher Radius)

Kugelkoordinaten:



$$\mathrm{x} = \mathrm{r}\sin\theta\cos\phi$$
$$\mathrm{y} = \mathrm{r}\sin\theta\sin\phi$$
$$\mathrm{z} = \mathrm{r}\cos\theta$$

Quantenzahlen n l	m$_\mathrm{l}$	Orbital	Eigenwert $\mathrm{E_n}$	norm. Radialfunktion $\mathrm{R_{n,l}(r)}$	norm. Winkelfunktion sphär. Koord. $\chi_{\mathrm{l,m_l}}(\theta,\phi)$	kart. Koord. $\chi_{\mathrm{l,m_l}}(\frac{x}{r},\frac{y}{r},\frac{z}{r})$
1 0	0	1s	$\mathrm{E_1}$	$\frac{2}{\sqrt{a_0^3}}e^{-\frac{r}{a_0}}$	$\frac{1}{2\sqrt{\pi}}$	$\frac{1}{2\sqrt{\pi}}$
2 0	0	2s	$\mathrm{E_2 = \frac{E_1}{4}}$	$\frac{1}{2\sqrt{2a_0^3}}(2-\frac{r}{a_0})e^{-\frac{r}{2a_0}}$	$\frac{1}{2\sqrt{\pi}}$	$\frac{1}{2\sqrt{\pi}}$
2 1	0	$\mathrm{2p_z}$	$\mathrm{E_2 = \frac{E_1}{4}}$	$\frac{1}{2\sqrt{6a_0^3}}\frac{r}{a_0}e^{-\frac{r}{2a_0}}$	$\frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}}\cos\theta$	$\frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}}\frac{z}{r}$
2 1	1	$\mathrm{2p_x}$	$\mathrm{E_2 = \frac{E_1}{4}}$	$\frac{1}{2\sqrt{6a_0^3}}\frac{r}{a_0}e^{-\frac{r}{2a_0}}$	$\frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}}\sin\theta\cos\phi$	$\frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}}\frac{x}{r}$
2 1	-1	$\mathrm{2p_y}$	$\mathrm{E_2 = \frac{E_1}{4}}$	$\frac{1}{2\sqrt{6a_0^3}}\frac{r}{a_0}e^{-\frac{r}{2a_0}}$	$\frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}}\sin\theta\sin\phi$	$\frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}}\frac{y}{r}$
3 0	0	3s	$\mathrm{E_3 = \frac{E_1}{9}}$		$\frac{1}{2\sqrt{\pi}}$	$\frac{1}{2\sqrt{\pi}}$
3 1	0	$\mathrm{3p_z}$	$\mathrm{E_3 = \frac{E_1}{9}}$			
3 1	1	$\mathrm{3p_x}$	$\mathrm{E_3 = \frac{E_1}{9}}$			
3 1	-1	$\mathrm{3p_y}$	$\mathrm{E_3 = \frac{E_1}{9}}$			
3 2	-1	$\mathrm{3d_{xy}}$	$\mathrm{E_3 = \frac{E_1}{9}}$		$\sqrt{\frac{15}{4\pi}}\sin^2\theta\sin\phi\cos\phi$	$\sqrt{\frac{15}{4\pi}}\frac{xy}{r^2}$
3 2	1	$\mathrm{3d_{xz}}$	$\mathrm{E_3 = \frac{E_1}{9}}$		$\sqrt{\frac{15}{4\pi}}\sin\theta\cos\theta\cos\phi$	$\sqrt{\frac{15}{4\pi}}\frac{xz}{r^2}$
3 2	0	$\mathrm{3d_{yz}}$	$\mathrm{E_3 = \frac{E_1}{9}}$		$\sqrt{\frac{15}{4\pi}}\sin\theta\cos\theta\sin\phi$	$\sqrt{\frac{15}{4\pi}}\frac{yz}{r^2}$
3 2	2	$\mathrm{3d_{z^2}}$	$\mathrm{E_3 = \frac{E_1}{9}}$		$\sqrt{\frac{15}{4\pi}}3\cos^2\theta-1$	$\sqrt{\frac{15}{4\pi}}\frac{3z^2-r^2}{r^2}$
3 2	-2	$\mathrm{3d_{x^2-y^2}}$	$\mathrm{E_3 = \frac{E_1}{9}}$		$\sqrt{\frac{15}{4\pi}}\sin^2\theta\cos2\phi$	$\sqrt{\frac{15}{4\pi}}\frac{x^2-y^2}{r^2}$