

## Themenkatalog zur Vorlesung

### Theoretische Chemie (Studiengang Molekulare Biotechnologie)

(SS 2007, H. Köppel)

- Hinführung zur Quantenmechanik
  - Historische Einführung
  
- Heuristik und Formalismus der Quantenmechanik
  - Welle-Teilchen-Dualismus
  - Unschärferelation
  - Schrödingergleichung, Hamiltonoperator, Wellenfunktion
  - Operatoren, Eigenwerte und Eigenfunktionen, Erwartungswerte
  
- Exakt lösbare Probleme
  - Teilchen im Kasten (Translation)
  - Harmonischer Oszillator (Vibration)
  - Starrer Rotator (Rotation)
  - H-Atom (Elektronische Zustände)
  
- Atome
  - He-Atom, Orbitale, Spin, Pauli-Prinzip
  - Elektronenkorrelation
  - Mehrelektronenatome, Aufbauprinzip
  
- Moleküle
  - Born-Oppenheimer-Näherung
  - Grundlagen der MO-Theorie, LCAO-Ansatz,  $H_2^+$
  - Grundlagen der VB-Theorie,  $H_2$  in MO- und VB-Näherung
  - Ionische und kovalente Bindung (van der Waals-Wechselwirkung ?)