

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 ?)