

Stoffkapitel der Vorlesung Theoretische Chemie I

Hans Lischka

I. Atomare Systeme

1. Wasserstoffatom

Hamiltonoperator, Energiezustände, Eigenfunktionen, Kugelflächenfunktionen

2. Mehrelektronensysteme

Hamiltonoperator, Beispiel He Atom

Struktur der Mehrelektronenwellenfunktion, Antisymmetrie

Spinorbitale, Raumorbitale, Pauliprinzip, Orbitalschema

3. Näherungsmethoden

Variationsprinzip, allgemein und Ritz'sches Variationsprinzip,

Matrixformulierung

Störungstheorie

4. Modell der unabhängigen Teilchen

Variationsrechnung am He Atom, Abschirmung

Konstruktion eines effektiven Einelektronen Hamiltonoperators (Coulomb- und Austauschanteil)

Übersicht über die Hartree-Fock Theorie, self-consistent-field (SCF) Verfahren, Basissatzapproximation

Koopmans's Theorem (Ionisierungsenergie)

5. Aufbauschema (Elektronenkonfigurationen) der Atome im Grundzustand

6. Atomares Termschema und Elektronenkonfiguration

Die Konfiguration $1s^2 2s^2 2p^2$ des Kohlenstoffatoms

Bahn- und Eigendrehimpuls, Singlett und Triplettzustände eines Zweielektronensystems

Kommutatoreigenschaften des nichtrelativistischen Hamiltonoperators

Klassifikation der p^2 Determinanten nach M_L und M_S , Termschema

Hund'sche Regel

7. **Spin-Bahn Kopplung**

Kommutatoreigenschaften und Drehimpulsoperatoren

Russel-Saunders Kopplung, jj Kopplung und intermediäre Kopplung

8. **Alkaliatome**

Rydbergformel – Quantendefekt

9. **Helium und Erdalkaliatome**

Singlett- und Triplettzustände

II. **Moleküle**

1. **Zweiatomige Moleküle**

Born-Oppenheimer Näherung, elektronische- und Kernschrodingergleichung

Potentialkurven allgemein, R_e , D_e , R_0 und D_0

Verletzung der Born-Oppenheimer Näherung – Alkalihalogenide

2. **H_2^+**

Hamiltonoperator

Kommutatoreigenschaften bez. Drehimpuls

Termsymbole

Potentialkurven, Grenzverhalten $R \rightarrow \infty$ (Dissoziation), $R \rightarrow 0$ (vereinigtes Atom)

Molekülorbitale (MOs), LCAO Ansatz

Ritz'sche Variationsrechnung \rightarrow Energieschema und Orbitale

3. **H_2**

Hamiltonoperator

Potentialkurven

MO Ansatz, Dissoziationsverhalten

Methode der Konfigurationswechselwirkung (configuration interaction, CI)

Valence-Bond (VB) Methode

Vergleich MO/VB Verfahren