

# Stoffkapitel der Vorlesung Theoretische Chemie II

Hans Lischka

## I. Einführung in die Gruppentheorie

1. Gruppenpostulate, Multiplikationstabelle, Untergruppen, Klassen
2. Symmetrioperationen, Molekülsymmetrie, Punktgruppen
3. Darstellungen, Ähnlichkeitstransformationen, reduzible und irreduzible Darstellungen, Orthogonalitätstheorem, Charaktertafeln
4. Direktprodukt von Darstellungen, Anwendung auf die Berechnung von Matrixelementen, Übergangintensitäten

## II. Zweiatomige Moleküle

1. MO Schema, Korrelationsdiagramme ( $R \rightarrow 0$ ,  $R \rightarrow \infty$ )
2. Energieaufspaltung (bindend, antibindend), homonuklear, chemische Bindung
3. Noncrossing rule
4. Aufbauschema zweiatomiger, homonukleare Moleküle
5. Heteronukleare zweiatomige Moleküle, Polarität der chemischen Bindung

## III. Elektronegativität

## IV. Mehratomige Moleküle

1. Symmetrieklassifikation der MOs von  $AH_2$  Molekülen (linear, gewinkelt)
2. Walshe Regeln für  $AH_2$  Moleküle

## V. Hybridorbitale

## VI. $\pi$ -Systeme und die Hückelmethode

## VII. Woodward-Hoffmann Regeln

1. Grundprinzipien (Symmetrieerhaltung)
2. MO und Zustandsdiagramme für: Äthylendimerisierung, Diels-Alder Reaktion von Äthylen mit Butadien und Zyklisierung von cis-Butadien.
3. Klassifikation nach symmetrie-erlaubten und –verbotenen Reaktionen
4. Biradikalreaktionen

## VIII. Übergangsmetallkomplexe

1. Prinzipien der Ligandenfeldtheorie, Symmetrie
2.  $d^1$  Konfiguration, Aufspaltung im Oktaederfeld
3.  $d^2$  Komplexe: Näherungen des schwachen und starken Feldes
4. Tanabe-Sugano Diagramme, Unterschiede schwaches/starkes Feld

## IX. Intermolekulare Wechselwirkungen

1. Intermolekulare Störungstheorie 1. und 2. Ordnung
2. Multipolentwicklung, allgemein und spezielle Beispiele

3. Coulomb- und Polarisationswechselwirkung
4. Dispersionswechselwirkung
5. Beiträge der intermolekularen Überlappung, Wasserstoffbrückenbindungen

**X. Rechenmethoden der Quantenchemie**

1. Hartree-Fock Methode, SCF Verfahren
2. Basissätze
3. Energiehyperflächen, Born-Oppenheimer Näherung (Wdh.), Darstellung der Energieflächen in inneren Koordinaten, Minima, Sattelpunkte
4. Post Hartree-Fock Methoden: Konfigurationswechselwirkung, Møller-Plesset Störungstheorie, Coupled Cluster Verfahren
5. Dichtefunktionaltheorie
6. Modellchemie: Vergleiche von Methoden
7. Semiempirische und Kraftfeldmethoden
8. Molekulardynamik
9. Solvation