

Ankündigung der Vorlesung 21311 V/Ü (2+2):

**Quantenchemie**  
Achtung: in Arminallee 22

Vorlesung	Montag 10-12, Arminallee 22, Hörsaal A Beginn 17.10.11
Übungen	1. Gruppe, Mittwoch 12-14, 24.16, Takustr. 3 2. Gruppe, Zeit und Ort nach Vereinbarung Beginn: 1. Vorlesungswoche
Klausur - Teil 1	Montag, 05.12.11, 10-12
Klausur - Teil 2	Montag, 13.02.12, 10-12
Nachholklausur - Teil 1 und 2	Montag, 12.03.12, 10-14

Inhalt der Vorlesung:

Grundlagen der Quantenmechanik (Drehimpuls, Wasserstoffatom, Spin)  
Born-Oppenheimer Näherung und Energiepotentialflächen für chemische Reaktionen  
Hartree-Fock Methode, LCAO-MO Näherung und Basissätze  
Näherung der Integrale und semiempirische Methoden (z.B. Hückel-Theorie)  
Korrelationsmethoden (Konfigurationswechselwirkung, Coupled-Cluster, Multireferenz-Methoden, Störungstheorie)  
Dichte-Funktional-Theorie

- Es wird circa 10 Hausaufgaben geben, die gelöst und abgegeben werden müssen. Für die erfolgreiche Teilnahme an der Veranstaltung sind 75% der Punkte in den Hausaufgaben nötig.
- Übungsleiter: Lukas Hammerschmidt (05.09) und Dr. Elena Voloshina: (35.14)
- Weitere Informationen bei Prof. Beate Paulus (35.17, b.paulus@fu-berlin.de).