

Vorlesungsankündigung für die **Veranstaltung 21306 a/b** im Wintersemester 2016/17

## Einführung in die Theoretische Chemie

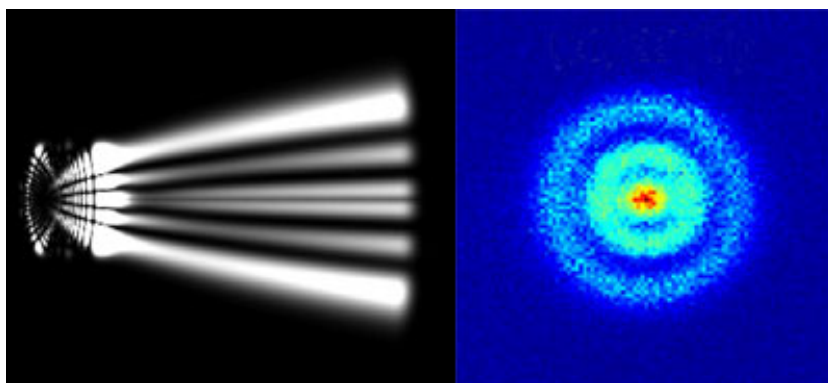


Figure taken from A. S. Stodolna, *PRL* **110**, 213001 (2013)

Dozentin: Prof. Bettina Keller  
[bettina.keller@fu-berlin.de](mailto:bettina.keller@fu-berlin.de), Raum 35.19

Übungen: Luca Donati  
[luca.donati@fu-berlin.de](mailto:luca.donati@fu-berlin.de), Raum 35.17

Oliver Lemke  
[oliver.lemke@fu-berlin.de](mailto:oliver.lemke@fu-berlin.de), Raum 35.17

Ort/Zeit: Vorlesung: Mittwoch, 8-10 Uhr, SR 33.03, Takustr. 3  
Übung: Donnerstag, 8-10 Uhr, CIP-Pool, Fabeckstr. 36a

Vorkenntnisse: Computerkenntnisse werden nicht vorausgesetzt. Vorherige Teilnahme an der Vorlesung „Atombau und chemische Bindung“, sowie an den Vorlesungen Mathematik I und II wird empfohlen.

### Vorlesungsinhalt:

In dieser Lehrveranstaltung werden grundlegende Konzepte und Methoden der zeitunabhängigen und zeitabhängigen Quantenmechanik für Modellsysteme der Chemie durch Vorlesung, Übung und Computerübung vermittelt. Dadurch soll ein vertieftes Verständnis für Eigenschaften von Molekülen und chemischen Reaktionen erreicht

- Grundlagen der Quantentheorie mit Vertiefung zum harmonischen und anharmonischen Oszillator sowie zum Drehimpuls und dem Wasserstoffatom
- Zeitunabhängige und zeitabhängige Quantenmechanik für einfache, chemisch relevante Systeme
- Näherungsverfahren zur Lösung der Schrödingergleichung
- Atome in elektrischen und magnetischen Feldern