

Dies ist die Sammlung des Materials von Dienstag, 25.10. und Freitag 28.10.2016 mit etwas zusätzlichem Hintergrundmaterial.

Inhalt:

1. **h2plus_verbessert.pdf**

Berechnungen mit der MO-Methode, dabei wurde der Radius der H-1s Basifunktionen auf $0.8 \cdot a_0$ verkleinert, um eine bessere Bindungsenergie zu erhalten.

2. **helium_kurz.pdf**

Symmetrieüberlegungen mit Elektronenspin am Beispiel des Helium Atoms.

3. **heitler_london.pdf**

Einführen der Heitler-London (Valenzbond) Methode für das neutrale H₂-Molekül

4. **h2mol_01.pdf**

Berechnung des H₂-Moleküls mit der Heitler-London Methode

5. **h2mol_02.pdf**

Berechnung mit der Hund-Mulliken (MO) Methode

6. **zwei_elektronen_integrale.pdf**

Hinweise zu den Berechnungen der Coulomb und Austausch Integrale.