

Angewandte Quantenchemie und Computerchemie (AnQCCC)				Stand: 15.05.2018		
Studiengang: B. Sc. Chemie				Modus: Qualifizierung		
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	Blockmodul 1. Semesterhälfte	SoSe	6.		
Lehrveranstaltungen		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
AnQCCC-Vorlesung		V	2	60	30	250
AnQCCC-Seminar		Sem	1	45	15	30
AnQCCC-Praktikum		PExp	6	135	90	15
Modulverantwortlicher		Prof. Dr. C. M. Marian				
Beteiligte Dozenten		Die Dozenten des Instituts für Theoretische Chemie und Computerchemie				
Sprache		deutsch/englisch				
Weitere Verwendbarkeit des Moduls		Studiengang			Modus	
		B. Sc. Wirtschaftschemie (anteilig)			Qualifizierung	
		B. Sc. Informatik			Wahlpflicht	
		M. Sc. Chemie			Wahlpflicht	
		M- Sc. Wirtschaftschemie			Wahlpflicht	
Lernziele und Kompetenzen						
Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls						
<ul style="list-style-type: none"> • die wichtigsten Methoden der Computerchemie anwenden • der Problemstellung angemessene Methoden und Basisätze auswählen • selbständig Geometrieoptimierungen an Molekülen durchführen und beurteilen • elektronische Anregungsspektren berechnen und interpretieren • eine Bachelorarbeit in der Theoretischen Chemie anfertigen 						
Inhalte						
<ol style="list-style-type: none"> 1. Quantenchemische Methoden für Eigenschaften von Molekülen im elektronischen Grundzustand (Hartree-Fock, Dichtefunktionaltheorie, Møller-Plesset-Störungstheorie, semiempirische Verfahren) 2. Grundzüge der statistischen Thermodynamik, Zustandssummen für Translation, Rotation, Schwingungs- und elektronische Energien 3. Einschätzen der Leistungsfähigkeit der quantenchemischen und semiempirischen Methoden 4. Interpretation der Ergebnisse von MO-Rechnungen 5. Suche nach Minima und Übergangszuständen, Reaktionswärmen (Wahl von Atomorbitalbasen, Bedeutung der Nullpunktsschwingungsenergie, Temperaturabhängigkeit, Lösungsmittelleffekte) 6. Berechnung elektronischer Anregungsspektren mit DFT/MRCI 						
Teilnahmevoraussetzungen		Erfolgreiche Teilnahme am Modul QCCC.				
Studienleistungen		Teilnahme an Vorlesung und Praktikum, Auswertung der Praktikumsaufgaben, Seminarvortrag.				
Zulassungsvoraussetzung zur Modulprüfung		Erfolgreicher Abschluss des AnQCCC-Praktikums.				
Prüfungen		Prüfungsform		Dauer [min]	benotet/unbenotet	
		Mündliche Einzelprüfung		30-45	benotet	
Stellenwert der Note für die Gesamtnote					8/180	

Sonstige Informationen
Aktuelle Informationen finden Sie auf ILIAS und im HIS-LSF und auf der Webseite des Instituts.
Literatur
Skript zur Vorlesung; C.J.Cramer „Essentials of Computational Chemistry“, Wiley 2004