

<b>Einführung in die Quanten- und Computerchemie</b>				Stand: 15.05.2018		
Studiengang: B. Sc. Chemie				Modus: Pflicht		
ECTS-Punkte	Arbeitsaufwand [h]	Dauer	Turnus	Studiensemester		
8	240	1 Semester	WiSe	5.		
<b>Lehrveranstaltungen</b>		Typ	Umfang [SWS]	Arbeitsaufwand [h]	Präsenzzeit [h]	Gruppengröße
QCCC Vorlesung		V	3	90	45	250
QCCC Seminar		Sem	1	30	15	30
QCCC Praktikum		PExp	4	120	60	15
<b>Modulverantwortlicher</b>		Prof. Dr. C. M. Marian				
<b>Beteiligte Dozenten</b>		Dozentinnen und Dozenten der Theoretischen Chemie				
<b>Sprache</b>		Deutsch (Fachwörter Englisch)				
<b>Weitere Verwendbarkeit des Moduls</b>		Studiengang			Modus	
		B. Sc. Wirtschaftschemie			Wahlpflicht	
		B. Sc. Informatik			Wahlpflicht	
<b>Lernziele und Kompetenzen</b>						
<p>Studierende können nach erfolgreichem Abschluss des Moduls</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• die Grundlagen der Quantenchemie wiedergeben</li> <li>• Energieniveaus und Wellenfunktionen der exakt lösbaren Modellsysteme skizzieren</li> <li>• Hückeltheorie sicher anwenden</li> <li>• Molekülorbitalschemata konstruieren</li> <li>• chemische Bindungen klassifizieren</li> <li>• Moleküleigenschaften im elektronischen Grundzustand mit Standardprogrammpaketen berechnen und interpretieren</li> <li>• Auswahlregeln für IR- und Ramanübergänge anwenden</li> </ul>						
<b>Inhalte</b>						
<b>Vorlesung</b>						
<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Observable und Operatoren: Was ist ein Operator? Eigenfunktionen und Eigenwerte, Eigenschaften quantenmechanischer Operatoren, Spektrum, Korrespondenzprinzip, zeitabhängige und zeitunabhängige Schrödingergleichung, Energiequantelung.</li> <li>2. Erwartungswerte und Varianz: Erwartungswerte, Varianz und Standardabweichung, Ehrenfesttheorem, Vertauschbarkeit von Operatoren, Unschärfe, Variationsprinzip für die Energie, Übergangswahrscheinlichkeiten.</li> <li>3. Das Hückel-Orbital-Modell: Näherungen im HMO-Modell, Ladungsordnung, Bindungsordnung, freie Valenz.</li> <li>4. Separation von Variablen: zweidimensionaler Kasten, Abseparation der Schwerpunktsbewegung, Wasserstoffatom, Wasserstofforbitale.</li> <li>5. Mehrelektronenatome: Näherung der unabhängigen Teilchen, Orbitale, Hartree-Näherung, Teilchenvertauschung, Slaterdeterminante, Hartree-Fock-Ansatz.</li> <li>6. Moleküle: Molekularer Hamiltonoperator, Born-Oppenheimer-Näherung, Elektronische Schrödingergleichung, LCAO-MO-Modell, gebräuchliche Basisfunktionen.</li> <li>7. Potentialhyperflächen: Stationäre Punkte, Koordinatenwahl, Geometrieoptimierung, Molekülschwingungen.</li> <li>8. Chemische Bindung: Einelektronenbindung, kovalente Bindung, delokalisierte Bindung, ionische Bindung, polare Bindung, intermolekulare Wechselwirkungen (statische, induzierte), Wasserstoffbrückenbindung, eindimensionaler Festkörper</li> <li>9. Kraftfelder und Molekülmechanik.</li> <li>10. Elektronenkorrelation (qualitativ): <ol style="list-style-type: none"> <li>a. Definition, Fermi-/Coulomb-Loch;</li> <li>b. Wellenfunktionsmethoden zur Beschreibung der Elektronenkorrelation: Multikonfigurationsansatz (CASSCF), Konfigurationswechselwirkung (CI), Møller-Plesset-</li> </ol> </li> </ol>						

<p>Störungstheorie (MP2);</p> <p>c. Dichtefunktionaltheorie: Hohenberg-Kohn-Theorem, Kohn-Sham-Gleichungen, Austauschkorrelationsfunktionale.</p> <p>11. Symmetrie in der Chemie: Klassifikation von Symmetrieeigenschaften, Richtung des Dipolmoments, Chiralität, reduzible und irreduzible Darstellungen, Ausreduzieren, Symmetrieeigenschaften von Schwingungsmoden, Auswahlregeln für Infrarot- und Ramanübergänge.</p> <p><b>Seminar</b> Seminarvortrag über ein Thema aus Vorlesung oder Praktikum</p> <p><b>Computerpraktikum</b></p> <p>1. Literaturrecherche und Chemiedatenbanken im Internet.</p> <p>2. Computergestützte Lösung von Übungen zur Vorlesung am PC unter Windows und Linux: Wellen und Interferenz, Aufenthaltswahrscheinlichkeit, Erwartungswerte, Wasserstoffatom</p> <p>3. Berechnung von Moleküleigenschaften mit Standardquantenchemieprogrammen: (a) Elektronische Schrödingergleichung (Teilchen im Kasten, Hückeltheorie, Restricted Hartree-Fock-Verfahren, Kohn-Sham-Verfahren); (b) Geometrieoptimierung; Konstitutionsisomere; (c) Molekülschwingungen und Kraftkonstanten, Übergangswahrscheinlichkeiten;</p>			
<b>Teilnahmevoraussetzungen</b>	Erfolgreiche Teilnahme an den Modulen MMC I und MMC II.		
<b>Studienleistungen</b>	Aktive Teilnahme an Praktikum und Seminar, Anwesenheitsaufgaben, Protokolle, Seminarvortrag		
<b>Zulassungsvoraussetzung</b> zur Modulprüfung	Erfolgreicher Abschluss des QCCC-Praktikums und des QCCC-Seminars.		
<b>Prüfungen</b>	Prüfungsform	Dauer [min]	benotet/unbenotet
	Klausur	120	benotet
<b>Stellenwert der Note für die Gesamtnote</b>			10/180
<b>Sonstige Informationen</b>			
Aktuelle Informationen finden Sie auf ILIAS und im HIS-LSF.			
<b>Literatur</b>			
<p>1. Skript zur Vorlesung</p> <p>2. Fachbücher:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• J. Reinhold, „Quantentheorie der Moleküle“, Teubner Studienbücher</li> <li>• W. Kutzelnigg, „Einführung in die Theoretische Chemie“, Wiley VCH</li> <li>• N.J.B. Green, Oxford Chemistry Primers “Quantum Mechanics 1: Foundations”, Oxford Science Publications</li> <li>• G.H. Grant and W.G. Richards, Oxford Chemistry Primers “Computational Chemistry”, Oxford Science Publications.</li> </ul>			